

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

VINÍCIUS JOSÉ HENRIQUE DA COSTA LEONARDI

**O FORMALISMO DE PACOTES DE ONDA APLICADO A
FENÔMENOS DE MÚLTIPLA DIFUSÃO E TUNELAMENTO**

Curitiba

2009

VINÍCIUS JOSÉ HENRIQUE DA COSTA LEONARDI

**O FORMALISMO DE PACOTES DE ONDA APLICADO A
FENÔMENOS DE MÚLTIPLA DIFUSÃO E TUNELAMENTO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Pedro Danizete Damázio.

Co-orientador: Prof. Dr. Stefano De Leo.

CURITIBA

2009



Ministério da Educação
Universidade Federal do Paraná
Setor de Ciências Exatas/Departamento de Matemática
Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada - PPGMA

ATA DA 21ª DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Aos cinco dias do mês de março de 2009, no Anfiteatro A – Prédio PC, do Setor de Ciências Exatas, da Universidade Federal do Paraná, foi instalada pelo Professor Hígido Portillo Oquendo, Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, a Banca Examinadora para a Vigésima Primeira Dissertação de Mestrado em Matemática Aplicada. Estiveram presentes ao Ato, professores, alunos e visitantes.

A banca examinadora, homologada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, ficou constituída pelos professores: Dr. Stefano De Leo, da Universidade Estadual de Campinas; Dr. Alex Eduardo de Bernardini, da Universidade Federal de São Carlos; Dr. Eduardo Hoefel, do Departamento de Matemática da UFPR; e Dr. Stefano De Leo, Co-orientador da dissertação a quem coube a presidência dos trabalhos.

Às treze horas e trinta minutos, a banca iniciou seus trabalhos, convidando o candidato **Vinícius José Henrique da Costa Leonardi** a fazer a apresentação do tema da dissertação intitulada "O Formalismo de Pacotes de Onda Aplicado a Fenômenos de Múltipla Difusão e Tunelamento". Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de arguição pelos membros participantes. Após a arguição, a banca com pelo menos 03 (três) membros, reuniu-se para apreciação do desempenho do pós-graduando.

A banca considerou que o pós-graduando fez uma apresentação com a necessária concisão. A Dissertação apresenta contribuição à área de estudos e não foram registrados problemas fundamentais de estrutura e redação, resultando em plena e satisfatória compreensão dos objetivos pretendidos.

Tendo em vista a dissertação e a arguição, os membros presentes da banca decidiram pela sua aprovação.

Curitiba, 05 de março de 2009.

Prof. Dr. Stefano De Leo
Presidente

Prof. Dr. Alex Eduardo de Bernardini
Titular

Prof. Dr. Eduardo Hoefel
Membro

À minha família e minha esposa Sandra, pelo apoio e amor incondicionais.

Agradecimentos

À misericórdia e graça Divina, fonte de sustento, paciência e motivação para qualquer trabalho.

À minha família, pelo apoio, carinho e dedicação incondicionais durante tantos anos.

À minha amada esposa Sandra, pela paciência infinita e suporte inabalável.

A todos os meus amigos que, de várias maneiras, sempre me ajudaram a crescer e ter uma vida agradável fora da universidade.

A todos os professores que nunca mediram esforços ao dedicarem atenção, cuidado e competência, desde a graduação, em especial, Gisele Ducati e Marcelo Muniz.

Aos meu orientadores Pedro Damázio e Stefano De Leo, por todo o apoio e rara destreza acadêmica na condução do trabalho.

Aos meus colegas de mestrado, por toda a ajuda que sempre dispuseram e pela amizade construída.

À pós-graduação em Matemática Aplicada do IMECC/Unicamp, na pessoa do professor Aurélio de Oliveira, pela ajuda de custos fornecida para viabilização de orientação.

À Fundação Araucária e CAPES, pelo financiamento via bolsa de estudos.

*“A Aprendizagem que me deram,
Desci dela pela janela das traseiras da casa.”*

Fernando Pessoa
“Tabacaria”

Resumo

Este trabalho tem como objetivo apresentar a fenomenologia da interação entre pacotes de onda e barreiras de potencial. O tunelamento é analisado numericamente, de onde se extraem informações qualitativas acerca dos tempos de transmissão e aparecimento de picos, as quais exigem um tratamento cuidadoso para o Efeito Hartman. Nos capítulos seguintes, a difusão sobre a barreira e o tunelamento através de duas barreiras idênticas são tratados via abordagem de múltiplos picos, cuja coerência e necessidade provêm da concordância com resultados gerais (difusão sobre degrau de potencial), efeitos de ressonância (no duplo tunelamento) e previsões de tempos dadas pelo Método da Fase Estacionária (que esclarecem o chamado Efeito Hartman Generalizado). Tal abordagem analítica concorda perfeitamente com as simulações numéricas expostas. A analogia entre as equações de Schrödinger com barreira de potencial e da onda elétrica monocromática em meio estratificado é explorada no último capítulo através da consideração de múltiplos feixes localizados com propagação através de uma barreira dielétrica.

Abstract

This work intends to present the phenomenology of interaction between wave packets and potential barrier. The tunnelling is numerically analyzed to extract qualitative info about the delay times and the appearance of peaks, what requires a careful treatment for the Hartman Effect. In the following chapters, the barrier diffusion and the tunnelling through two identical barriers are studied with the approach of multiple peaks, which coherence and need comes from the agreement of general results (above potential step), resonance effects (in the double tunnelling) and time forecasts given by the stationary phase method (that clarifies the so-called Generalized Hartman Effect. This analytical approach perfectly consents with the displayed numerical simulations. The analogy between the Schrödinger equation with potential barrier and the monochromatic transverse electric in a stratified medium is explored in the last chapter regarding multiple localized reflected and transmitted beams through dielectric barriers.

Conteúdo

1	Introdução	9
2	Efeito Hartman	12
2.1	Soluções estacionárias da equação de Schrödinger	12
2.2	Barreira de potencial unidimensional	14
2.3	Pacotes de onda unidimensionais	15
2.4	Pacotes de onda transmitidos pela barreira unidimensional	16
2.5	Paradoxo de Hartman	18
3	Múltipla Difusão	20
3.1	MFE aplicado à difusão	20
3.2	Difusão de múltiplos picos	23
4	Tunelamento Através De Duas Barreiras	30
4.1	Potencial de duas barreiras	30
4.2	Multiplicidade de picos	34
4.3	Transição entre unicidade e multiplicidade de picos	37
5	Barreira Dielétrica	39
5.1	Equação da onda elétrica transversal	39
5.2	Coeficientes de transmissão e reflexão	41
5.3	Localização de feixes	43
APÊNDICES		46
A.1	Método da Fase Estacionária (MFE)	46
A.2	Coeficientes de N barreiras	48
A.3	Gráficos	50
Bibliografia		62

Capítulo 1

Introdução

O estudo da transmissão quântica de uma partícula através de uma barreira de potencial cuja altura excede sua energia total (tunelamento) remonta à década de 1930 [1],[2]. O interesse em tal fenômeno tem se renovado ao longo do século XX até os dias atuais devido ao desenvolvimento teórico e experimental de áreas como Física sub-nuclear, nuclear, e atômica.

A principal problemática referente ao tunelamento concentra-se nas definições e estimativas dos tempos de transmissão e da velocidade da partícula através da barreira. Definições diferentes do tempo de tunelamento já desenvolvidas e os métodos de obtenção do mesmo podem ser separados em três grupos. O primeiro avalia o tempo de transmissão diretamente por meio da dinâmica do pacote de onda, utilizando o Método da Fase Estacionária (MFE) [3]-[5] ou a média temporal sobre os fluxos de probabilidade [6]-[8]. O segundo grupo descreve caminhos na região da barreira, de onde se obtém o tempo de tunelamento. Segundo integrais de caminho de Feynman, a diferença entre o primeiro e último instantes de interseção da trajetória, curva $x(t)$, com as interfaces da barreira fornece o tempo de tunelamento. Podem ser incluídas nesse grupo as abordagens de Bohm [10], [9] e distribuição de caminhos de Wigner [11]. Um terceiro grupo introduziu um novo grau de liberdade ao considerar a precessão de Larmor do spin da partícula em torno de um campo magnético na região do potencial perpendicular à direção de propagação [12] ou a adição ao potencial de uma dependência temporal harmônica [13],[14].

Considerando métodos desenvolvidos anteriormente [15],[16] e utilizando pacotes de onda como solução da equação de Schrödinger, Hartman[3] obteve uma descrição teórica sobre o tempo para o qual encontra-se o pico do pacote transmitido tomando a derivada em relação ao momento da fase das soluções encontradas (segundo o Método da Fase Estacionária). Tal previsão resultou em algo surpreendente: a independência do tempo de transmissão em relação à largura da barreira quando a mesma é suficientemente grande. Além disso, ele se torna menor que aquele necessário para a partícula percorrer uma distância

igual à largura da barreira livremente. Hartman também observou o deslocamento da energia média do pacote de onda transmitido em relação ao incidente, evidenciando o papel de filtragem da barreira (preferência de transmissão de componentes mais velozes) cujas correções podem ser obtidas explicitamente [5],[17].

Pode-se considerar também um tempo médio gasto pela partícula no interior da barreira, região classicamente proibida [8], [12], [18],[19] (sob o ponto de vista do espalhamento [6], [7], [12], [13], [20], dado em função da probabilidade de encontrar partículas nesta região e seu fluxo através do potencial). Ele pode ser definido por $\tau_d = \int_0^L |\Psi(x)|^2 / j_{inc}$, [12], onde j_{inc} é o fluxo incidente (igual a velocidade de grupo de uma partícula livre e^{ikx}). Este tempo de permanência na barreira pode ser relacionado com aquele dado via MFE. De fato, definindo $\tau_g = |R|^2 \tau_R + |T|^2 \tau_T$, onde $|R|^2, |T|^2$ e τ_R, τ_T são as probabilidades de reflexão e transmissão com seus respectivos tempos (dinâmica dos picos dada pelas derivadas da fases), tem-se $\tau_g = \tau_d + \tau_i$, sendo $\tau_i = -Im(R)/k j_{inc}$ um termo referente à interferência entre os pacotes incidente e refletido em frente à barreira. Esta relação entre tempos pode ser obtida através da análise dos pacotes de onda [5] ou, de forma mais simples, por propriedades gerais das soluções estacionárias da equação de Schrödinger [21], [22]. Além disso, para uma barreira simétrica $\tau_R = \tau_T = \tau_g := \tau$. A integração em $(0, L)$ fornece independência de τ_d em relação a L 's grandes. Explorando a analogia entre tunelamento de partículas e fótons [23]-[25] (evidenciada pela equivalência matemática entre as equações de Schrödinger e Helmholtz), experimentos óticos [26]-[29], eletromagnéticos [30]-[35] e acústicos [36],[37] comprovaram a mesma independência em τ (Efeito Hartman). Tal resultado implica em velocidades de transmissão maiores que aquela de uma partícula livre e, no limite de grandes velocidades, em um efeito superluminal, com aparente violação de causalidade, quando considerada a “velocidade” $\nu := L/\tau$. Apesar da preferência de transmissão de componentes de maior momento e da validade do MFE somente para barreiras relativamente estreitas [38], é possível recuperar a precisão do mesmo e a relação exata entre τ_d e τ para dois pacotes incidindo simetricamente sobre o potencial [39].

É importante destacar a diferença conceitual entre τ e um tempo de trânsito propriamente dito, uma vez que este pressupõe o deslocamento de uma partícula entre dois pontos. Evita-se uma interpretação ingênua de ν ao notar que o pacote de onda transmitido está atrelado à existência de outro refletido. Assim, o Efeito Hartman pode ser visto como a saturação da probabilidade [40] (da energia, no caso eletromagnético [41], ou do número de partículas [21], na situação de espalhamento) na região do potencial.

Na presente dissertação são descritos os casos não-relativísticos e a dinâmica dos pacotes de onda. O tempo de tunelamento é calculado observando a localização dos picos incidente e transmitido. Avalia-se transmissão via potenciais de barreira simples e dupla (capítulo 4), a difusão e a analogia ótica de tais fenômenos, explorando a similaridade entre as equações de Schrödinger e da onda elétrica em meio estratificado.

O segundo capítulo contém as noções matemáticas utilizadas em todo o texto (equação de Schrödinger e pacotes de onda, seções 1-3) seguida do estudo numérico do tunelamento via uma barreira de potencial. Admite-se o tempo de transmissão como sendo o instante no qual surge o pico na região posterior à barreira. Daí surge um importante resultado a respeito do tempo de tunelamento, com dependência linear deste em relação à largura do potencial. São verificadas também as contribuições devidas às componentes mais lentas e velozes incidentes, o que explicita um ponto tão sutil quanto relevante do fenômeno: surgimento do pico transmitido anterior ao encontro daquele incidente com a barreira.

No terceiro capítulo é analisada a difusão sobre uma barreira através da perspectiva de múltiplos picos [42],[43] considerando a dinâmica dos pacotes de onda na região do potencial e as reflexões e transmissões associadas às interações de cada pico com as interfaces de descontinuidade do potencial. Compara-se os resultados referentes à ressonância e tempos de atraso com o caso limite do degrau de potencial e as previsões do Método da Fase Estacionária (MFE).

No quarto capítulo aplica-se a técnica utilizada no capítulo 3 [44], com o objetivo de avaliar a validade do chamado Efeito Hartman Generalizado (independência em relação às larguras e distância entre as barreiras [8]) e a condição de ressonância fornecida por uma segunda região de potencial não nulo (não há transmissão total para o caso da barreira única). Avalia-se numericamente os limites para os quais os múltiplos pacotes de onda ficam separados ou superpostos, bem como a aplicação do MFE.

No quinto capítulo, utiliza-se técnica análoga aos capítulos 3 e 4 para explorar a múltipla difusão de uma onda elétrica transversal devido à mudança de índice de refração em um meio estratificado [45]. Tal abordagem aproxima a teoria anterior de uma possível verificação experimental.

Capítulo 2

Efeito Hartman

Neste capítulo se procura evidenciar detalhes das soluções da Schrödinger com uma barreira de potencial, destacando a dinâmica de transmissão através da mesma. As descrições numéricas aqui apresentadas trazem à tona efeitos sutis, porém importantes para a compreensão do fenômeno de tunelamento, destacando-se resultados referentes ao tempo de transmissão: dependência linear para barreiras largas e encontro do pico incidente com a barreira posterior ao surgimento daquele transmitido.

2.1 Soluções estacionárias da equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger é dada por

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, $\Psi : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{C}$, $V : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$ e ∇^2 é o operador Laplaciano $\partial_{xx}^2 + \partial_{yy}^2 + \partial_{zz}^2$.

Segue da equação (2.1) que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ satisfaz a equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall (\mathbf{r}, t) \in \mathbb{R}^4 \quad , \quad (2.2)$$

tal que

$$\mathbf{J} = -i [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] = 2 \operatorname{Im}[\Psi^* \nabla \Psi] \quad \text{e} \quad \rho = |\Psi|^2 \quad ,$$

onde $\nabla \cdot \mathbf{J} = \partial_x J_x + \partial_y J_y + \partial_z J_z$.

Quando

$$V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \quad ,$$

o método da separação de variáveis fornece soluções da equação (2.1) dadas por

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})e^{-iE(k)t} \quad , \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$, $k := \|\mathbf{k}\|$ e $E(k) = k^2$ (constante em relação a \mathbf{r} e t). Além disso, ϕ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo

$$E(k)\phi(\mathbf{r}) = -\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.4)$$

cuja solução são conhecidas como *soluções estacionárias da equação de Schrödinger*. Se

$$V(\mathbf{r}) = V(x) \quad ,$$

novamente por separação de variáveis segue que

$$\phi(\mathbf{r}) = \varphi(x)e^{ik_2y}e^{ik_3z} \quad , \quad (2.5)$$

cuja função φ satisfaz a equação

$$E(k)\varphi(x) = -\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k_2^2\varphi(x) + k_3^2\varphi(x) + V(x)\varphi(x) \quad ,$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = [V(x) - k_1^2] \varphi(x) \quad . \quad (2.6)$$

2.2 Barreira de potencial unidimensional

Seja o caso unidimensional da equação (2.5), tomando $k_2 = k_3 = 0$, com um potencial dado por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in (-\infty, a] \cup [b, +\infty) \\ 1 & x \in (a, b) \end{cases} . \quad (2.7)$$

Neste capítulo será examinado o tunelamento, ou seja, $E(k) = k^2 < 1$, onde $k = k_1$. A solução da equação (2.6) para o potencial (2.7) com uma partícula incidente de momento positivo, e^{ikx} , fica escrita como

$$\varphi(x, k; a, b) = \begin{cases} \varphi_1(x, k; L, a) = e^{ikx} + R(k; a, b)e^{-ikx} & x \leq a \\ \varphi_2(x, k; a, b) = B(k; a, b)e^{\rho(k)x} + B'(k; a, b)e^{-\rho(k)x} & a < x < b \\ \varphi_3(x, k; a, b) = T(k; a, b)e^{ikx} & x \geq b \end{cases} , \quad (2.8)$$

onde $\rho(k) = \sqrt{1 - k^2}$ e as condições de continuidade da solução e sua derivada nos pontos $x = a$ e $x = b$ fornecem

$$\begin{aligned} R(k; a, b) &= -i \frac{1}{2k\sqrt{1 - k^2}} \tanh(\sqrt{1 - k^2} L) \cos(\alpha(k; L)) e^{i(\alpha(k; L) + 2ka)} = -i |R(k; L)| e^{i(\alpha(k; L) + 2ka)} , \\ T(k; a, b) &= T(k; L) = \frac{\cos(\alpha(k; L))}{\cosh(\sqrt{1 - k^2} L)} e^{i(\alpha(k; L) - kL)} = |T(k; L)| e^{i(\alpha(k; L) - kL)} , \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde

$$\alpha(k; L) = \arctan \left\{ \frac{(2k^2 - 1)}{2k\sqrt{1 - k^2}} \tanh(\sqrt{1 - k^2} L) \right\} \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right) , \quad L = b - a .$$

As soluções da equação (2.1) para cada região são $\Psi_j(x, t, k) = \varphi_j(x, t, k)e^{-ik^2 t}$, $j = 1, 2, 3$, cujas funções e^{ikx} , $R(k; a, b)e^{-ikx}$ e $T(k; L)e^{ikx}$ descrevem as ondas incidente, refletida e transmitida, respectivamente. Sem perda de generalidade, o coeficiente unitário foi atribuído à incidência. Além disso, da equação da continuidade (2.2) segue que $|T|^2 + |R|^2 \equiv 1$.

Por outro lado, para uma partícula vinda de $-\infty$ com momento negativo (e^{-ikx}), basta efetuar nos coeficientes acima $k \mapsto -k$ e $a \leftrightarrow b$, obtendo-se

$$\varphi(x, k; a, b) = \begin{cases} \varphi_1(x, k; a, b) = e^{-ikx} + R_-(k; a, b)e^{+ikx} & x \geq b \\ \varphi_2(x, k; a, b) = B_-(k; a, b)e^{\rho(k)x} + B'_-(k; a, b)e^{-\rho(k)x} & a < x < b \\ \varphi_3(x, k; L) = T_-(k; L)e^{ikx} & x \leq a \end{cases}, \quad (2.10)$$

onde

$$\begin{aligned} R_-(k; a, b) &= -i |R(k; L)| e^{i(\alpha(k; L) - 2kb)} , \\ T_-(k; L) &= T(k; L) = |T(k; L)| e^{i(\alpha(k; L) - kL)} . \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.3 Pacotes de onda unidimensionais

Fisicamente, soluções de ondas planas informam que a partícula tem probabilidade de estar em qualquer posição para todo tempo. Por outro lado, podem ser obtidas soluções de (2.1) que estejam localizadas no espaço. De fato, tais soluções existem desde que seja imposta a condição inicial $\|\Psi\|_{L^2[\mathbb{R}]} = \|g\|_{L^2[\mathbb{R}]} < \infty$ para $t = 0$.

Seja

$$\Psi(x, t; k_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k; k_0) \varphi(x, k) e^{-ik^2 t} dk , \quad (2.12)$$

onde

$$g(k; k_0, d) = e^{-d^2(k-k_0)^2/4} ; \quad k \in (0, 1) , \quad (2.13)$$

distribuição gaussiana centrada em k_0 , com $\Delta k := 1/d$. As soluções $\Psi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ descritas pelas fórmulas acima são quadrado-integráveis, formando pacotes de onda. Segundo a equação (2.12), tais soluções podem ser interpretadas como superposições de autoestados associados a um espectro contínuo de autovalores $E(k)$, onde k_0 indica o centro da distribuição espectral. Os valores $|\Psi(x, t)|^2 dx$ e $|g(k, t)|^2 dk$ descrevem as probabilidades da partícula ser encontrada a um instante t com posição entre x e $x + dx$ e número de onda

entre k e $k + dk$ e, pela fórmula de Parseval-Plancherel, $\|\Psi\|_{L^2[\mathbb{R}]}(t) = \|g\|_{L^2[\mathbb{R}]}(t)$. Uma vez que $g(k, t; k_0, d) = g(k, 0; k_0, d)e^{-ik^2t}$, segue que $\|\Psi\|_{L^2[\mathbb{R}]}(t) = \|\Psi\|_{L^2[\mathbb{R}]}(0)$ para todo t .

2.4 Pacotes de onda transmitidos pela barreira unidimensional

O pacote de onda livre associado à partícula **incidente** com distribuição de momento dada por (5.19) fica escrito como

$$\Psi_{inc}(x, t; k_0, d) = N \int_0^1 g(k; k_0, d) e^{ikx - ik^2t} dk, \quad (2.14)$$

onde $N = \sqrt{d}/(2\pi)^{3/4}$ é constante de normalização. Completando o quadrado do argumento da exponencial do integrando segue

$$\begin{aligned} -\frac{d^2}{4}(k - k_0)^2 + i(kx - k^2t) &= -(k - k_0)^2[d^2/4 + it] + (k - k_0)[ix - i2k_0t] + ik_0x - ik_0^2t = \\ &= -u(k)^2 - \frac{(x - 2k_0t)^2}{4(d^2/4 + it)} + ik_0x - ik_0^2t \quad ; \quad u(k) = (k - k_0)(d^2/4 + it)^{1/2} - \frac{i(x - 2k_0t)}{2(d^2/4 + it)^{1/2}}, \end{aligned}$$

de modo que a integração através da mudança de variáveis fornece

$$\Psi_{inc}(x, t; k_0, d) = \left[\frac{2d^2}{\pi(d^2 + 16t^2)} \right]^{1/4} e^{-\frac{d^2(x - 2k_0t)^2}{(d^4 + 16t^2)} + i(k_0x - k_0^2t - \beta)} \quad (2.15)$$

onde $\beta = \frac{1}{2} \arctan(4t/d^2) - \frac{4t(x - 2k_0t)^2}{(d^4 + 16t^2)}$ e N é escolhido de maneira que $\|\Psi_{inc}\|_{L^2[\mathbb{R}]} \equiv 1$.

Para fins de simplificação pode-se tomar $a = 0$ na posição da barreira de potencial dada pela equação (2.7). A expressão (2.15) evidencia que a posição para a qual $|\Psi_{inc}(x, t; k_0, d)|$ é máximo satisfaz $x_{inc}^M - 2k_0t = 0 \Leftrightarrow x_{inc}^M = x_{inc}^M(t) = 2k_0t$, cuja previsão é dada pelo Método da Fase Estacionária (MFE) sem necessidade de efetuar a integração. Nota-se que a posição inicial é dada por $x_{inc}^M(0) = 0$, ou seja, o pico incidente encontra-se em contato com a barreira para $t = 0$, a menos de efeitos de interferência.

Uma vez que a escolha do pacote de onda é uma condição de contorno para a obtenção das soluções, pode-se tomar d de tal maneira que a função obtida seja a mais suave possível, sem perda de generalidade. A fim de obter um pacote de onda que decresce suavemente (sem oscilações) à medida que $|x - x_0|$ aumenta, é necessário que $\Delta k = 1/d$ seja suficiente-

mente pequeno de tal maneira que a integração sobre $(0, 1)$ tome $|g(k; k_0)|$ desde seu máximo até valores muito próximos de 0. Quando isso não ocorre, a função g é aproximadamente constante sobre tal intervalo, fornecendo $|\Psi_{inc}(x, t, k_0, d)|$ repleto de oscilações.

É importante salientar que a distribuição de momento (5.19) exclui qualquer possibilidade de difusão, pois $k^2 < 1$. O pacote de onda **transmitido** é dado via integração (2.12), com φ assumindo as soluções estacionárias (2.8) associadas à transmissão:

$$\Psi_{tra}(x, t; k_0, d, L) = N \int_0^1 g(k; k_0, d) T(k; L) e^{ikx - ik^2 t} dk \quad . \quad (2.16)$$

A figura 1 ilustra a transmissão através de duas barreiras diferentes: uma com L da ordem de $\Delta x_{inc}(0) = d/2$ e outra consideravelmente mais larga que o pacote de onda incidente. A velocidade de propagação do pico transmitido pode ser obtida através da estimativa de sua posição para cada instante de tempo. Numericamente, é fácil confirmar que ela é dada por $2\hat{k}$, onde

$$\hat{k} = \frac{\int_0^1 k |g(k; k_0, d) T(k; L)|^2 dk}{\int_0^1 |g(k; k_0, d) T(k; L)|^2 dk} \quad (2.17)$$

As distribuições de momento dos pacotes de onda transmitidos decorrem da faculdade de filtragem da barreira de pontencial: as componentes de maior momento tem preferência de transmissão. Este resultado é natural e intuitivo, uma vez que a capacidade de transposição de um potencial depende da energia cinética envolvida. A figura 2 ilustra algumas distribuições associadas à transmissão. À medida que a largura aumenta, a média da distribuição sobre k fica cada vez maior e a função $g(k; k_0, d)|T(k; L)|$ se torna, gradativamente, diferente de uma distribuição gaussiana. Por outro lado, para $0 < L \simeq d/2 = \Delta x_{inc}(0)$ as funções Ψ_{tra} estão sujeitas à aplicação do Método da Fase Estacionária que garante, a priori, a velocidade de propagação do pico transmitido igual a $2\hat{k}$.

Pode-se definir o **tempo de transmissão** τ como aquele mensurado entre o encontro do pico incidente com a barreira e o surgimento daquele transmitido na extremidade oposta da mesma, sendo $x_{tra}^M(\tau) = L$ quando $x_{inc}^M(0) = L$. O gráfico da figura 3 mostra tempos de transmissão obtidos numericamente para diferentes proporções de L . Tais valores são aqueles que satisfazem $|\Psi(L, \tau; k_0, d, L)| = \max_{t>0} |\Psi(L, t; k_0, d, L)|$. A partir de $L \approx d$, o tempo de transmissão cresce linearmente com o aumento de L . Os tempos de transmissão $\tau(L)$ são previstos satisfatoriamente pelo MFE para L 's da ordem do pacote incidente, ou seja,

$$\tau(L) = \frac{1}{2k_0} \left. \frac{\partial \alpha(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0} \quad \text{para } 0 < L \simeq \Delta x_{inc}(0)$$

Os resultados observados acima diferem drasticamente da previsão do Efeito Hartman, segundo o qual para $L\sqrt{1-k^2} \gg 1$ o tempo de transmissão se torna independente da largura da barreira. Tal comportamento de $\tau(L)$ pode ser obtido quando, por exemplo, o Método da Fase Estacionária é aplicado sem a devida consideração de suas restrições de validade ($0 < L \sim \Delta x_{inc}$, figura 2). De fato, há precisão satisfatória do mesmo no cálculo do tempo de tunelamento através de barreiras finas, porém $\tau(L)$ cresce de maneira monótona e praticamente linear com o alargamento do potencial.

2.5 Paradoxo de Hartman

O tunelamento através de barreiras muito largas se deve às componentes incidentes cujos valores de energia são muito próximo àqueles do potencial (figura 2). Além da observação do pacote transmitido na vizinhança de $x = L$, é conveniente comparar sua dinâmica àquela do pico incidente.

A figura 4 mostra um resultado importante. A barreira de potencial está afastada em relação ao pico de $|\Psi_{inc}|$ e o máximo de $|\Psi_{tra}|$ surge em $x = b$ após o instante $\tau(L) + x_{inc}^M(t)/2k_0$ (onde o segundo termo é o tempo de percurso do pico incidente com posição inicial $x_{inc}^M(0) = 0$, pelo MFE). Assim, o tunelamento é anterior ao encontro da partícula incidente com o potencial (no sentido probabilístico). Tal fenômeno se evidencia somente com barreiras muito largas.

O fenômeno descrito acima pode ser compreendido pelas funções expostas nas figuras 5 e 6. Na primeira são descritas evoluções de pacotes de onda do tipo:

$$\begin{aligned}\Psi_{inc}^-(x, t; k_0, d) &= N \int_0^\epsilon g(k; k_0, d) e^{ikx - ik^2 t} dk, \\ \Psi_{inc}^0(x, t; k_0, d) &= N \int_\epsilon^{1-\epsilon} g(k; k_0, d) e^{ikx - ik^2 t} dk, \\ \Psi_{inc}^+(x, t; k_0, d) &= N \int_{1-\epsilon}^1 g(k; k_0, d) e^{ikx - ik^2 t} dk,\end{aligned}\tag{2.18}$$

tal que $\Psi_{inc}^- + \Psi_{inc}^0 + \Psi_{inc}^+ = \Psi_{inc}$ e toma-se $\epsilon \ll 1$, de modo que as funções de onda acima representam as componentes lenta, média e veloz, respectivamente, do pacote de onda incidente. Nota-se que para $t < 0$ as componentes estão claramente desvincilhadas, com o pico $|\Psi_{inc}^-(x, t)|$ seguindo à frente daqueles de $|\Psi_{inc}^0(x, t)|$ e $|\Psi_{inc}^+(x, t)|$, ao passo que as funções se sobrepõem em $(x, t) = (0, 0)$, com nova separação em $t > 0$, onde o pacote de onda mais veloz já se adianta em relação aos outros dois. Assim, o pacote de onda completo incidente mostrado na figura 4 possui, implicitamente, uma componente veloz cujo pico está muito

próximo da barreira, em torno de $x = a$.

A componente $|\Psi_{inc}^+|$ é a principal responsável pelo tunelamento, como pode ser visto na figura 6, sendo válido os valores $\tau(L)$ dados no gráfico 3, com a ressalva de que estes são intervalos de tempo mensurados entre a incidência do pico de $|\Psi_{inc}^+|$ nas proximidades de a e o surgimento daquele transmitido. De fato, $|\Psi_{tra}|$ também possui pequenas contribuições devidas à transmissões de $|\Psi_{inc}^0|$ e $|\Psi_{inc}^-|$ e, portanto, seu pico surge em $x = b$ no mesmo instante em que o ponto de máximo de $|\Psi_{tra}^+|$ está um pouco à esquerda de a , embora muito próximo.

Evidentemente, os resultados observados nesta seção são válidos apenas para barreiras muito largas em relação ao pacote de onda incidente, uma vez que são estas que priorizam fortemente a transmissão de componentes associadas aos maiores valores de momento.

Capítulo 3

Múltipla Difusão

No presente capítulo a difusão sobre a barreira ($E(k) > 1$) é analisada. Neste caso, as soluções da equação de Schrödinger na região de potencial não nulo têm formas de pacotes de ondas, cujas interações com as extremidades da barreira geram reflexões e transmissões nas regiões de propagação livre. As funções associadas à probabilidade de encontrar a partícula em cada posição se dão por meio de múltiplos picos, ou seja, os pacotes de onda são formados através de composições de sequências de probabilidades associadas às múltiplas interações ocorridas em cada descontinuidade do potencial. Tal descrição se torna clara e relevante para difusão de pacotes de onda suficientemente estreitos em relação à barreira, em contraste com casos em que haja importante superposição das múltiplas funções (proximidade entre picos).

3.1 MFE aplicado à difusão

Sejam uma barreira de potencial unidimensional (2.7) posicionada em $a = 0$ e uma partícula incidente com $k > 1$. As ondas planas que satisfazem a equação de Schrödinger são

$$\begin{aligned}
\psi_1(x, t, k; L) &= e^{i(kx - k^2 t)} + R(k; L)e^{-i(kx + k^2 t)} & x \leq 0 \\
\psi_2(x, t, k; L) &= A(k; L)e^{i(q(k)x - k^2 t)} + B(k; L)e^{-i(q(k)x + k^2 t)} & 0 < x < L \\
\psi_3(x, t, k; L) &= T(k; L)e^{i(kx - k^2 t)} & x \geq L \quad ; \\
q(k) &= \sqrt{k^2 - 1} \quad .
\end{aligned} \tag{3.1}$$

As condições de continuidade dos estados estacionários associados em 0 e L fornecem

$$\begin{aligned}
A(k; L) &= k(k + q)e^{i(\lambda(k; L) - qL)/D(k; L)}, \quad B(k; L) = k(q - k)e^{i(\lambda(k; L) + qL)/D(k; L)}, \\
R(k; L) &= \sin(qL)e^{i(\lambda(k; L) - \pi/2)/D(k; L)}, \quad T(k; L) = 2kqe^{i(\lambda(k; L) - kL)/D(k; L)},
\end{aligned} \tag{3.2}$$

onde

$$D(k; L) = [4k^2 q^2 + \sin^2(qL)]^{1/2}, \quad \lambda(k; L) = \arctan[(k^2 + q^2)\tan(qL)/2kq] \quad .$$

Podem ser formadas soluções via de pacotes de onda, como feito no capítulo 2, tomando a função gaussiana $g(k; k_0)$ dada pela equação (5.19), com Δk suficientemente pequeno para a aplicação do MFE e distribuição de energia que evite efeitos de tunelamento, ou seja, com $g(k; k_0) = 0 \quad \forall k \in (0, 1)$. Obtém-se os pacotes de onda associados às ondas planas incidente, refletida, transmitida e àquelas na região $(0, L)$. As soluções tem a forma geral:

$$\psi(x, t; k_0, L) = \int_1^\infty g(k; k_0)C(k; L)e^{i\alpha(k; L)} dk$$

onde C se refere a cada onda plana que compõe as soluções (3.1) de cada região. As fases associadas são

$$\begin{aligned}
\alpha_{inc}(x, t, k) &= kx - k^2 t \\
\alpha_{ref}(x, t, k; L) &= \lambda(k; L) - \pi/2 - kx - k^2 t \\
\alpha_A(x, t, k; L) &= \lambda(k; L) + q(k)(x - L) - k^2 t \\
\alpha_B(x, t, k; L) &= \lambda(k; L) + q(k)(L - x) - k^2 t \\
\alpha_{tra}(x, t, k; L) &= \lambda(k; L) + k(x - L) - k^2 t.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Para o pacote de onda incidente o MFE fornece

$$\left. \frac{\partial \alpha_{inc}(x, t, k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} = 0 \Leftrightarrow x_{inc}^M(t) = 2k_0 t, \quad (3.4)$$

portanto, $x_{inc}^M(0) = 0$.

Semelhantemente ao problema do tunelamento (capítulo anterior), as distribuições médias de momento sofrem deslocamentos em relação àquela incidente k_0 . No caso do pacote de onda refletido, $|R(k; L)|g(k; k_0)$ possui um ponto médio $\tilde{k} < k_0$. O MFE aplicado a k_0 e \tilde{k} fornece tempos para os quais se prevê a localização do pico em $x_{ref}^M = 0$. Assim como para as outras soluções, é fácil verificar numericamente que a diferença entre ambos é desprezível e a previsão é satisfatória para k_0 adequado. Neste caso, o tempo de reflexão para o qual $x_{ref}^M(t_{ref}) = 0$ fica expresso por

$$t_{ref} = \frac{1}{2k_0} \left. \frac{\partial \lambda(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0}, \quad (3.5)$$

onde

$$\frac{\partial \lambda(k; L)}{\partial k} = \frac{2}{q} \cdot \frac{(k^2 + q^2)k^2 q L - (k^2 - q^2)^2 \sin(qL) \cos(qL)}{4k^2 q^2 + (k^2 - q^2)^2 \sin^2(qL)}.$$

Após a incidência do pacote de onda em torno de $x = 0$, o pico refletido aparece nesta região depois de um tempo de atraso $\Delta t_{ref} = t_{ref}$. A fim de expressar a grandeza Δt_{ref} de maneira simples, pode-se tomar o centro k_0 de $g(k; k_0)$ próximo do valor para o qual $q_0 = q(k_0)$ satisfaz a condição de ressonância $\sin(q_0 L) = 0 = |R(k_0, L)|$. Nestas condições,

$$\left. \frac{\partial \lambda_{res}(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0} \approx \frac{(k_0^2 + q_0^2)L}{2q_0^2},$$

cujas substituição na equação (3.5) fornece um tempo de atraso

$$\Delta t_{ref}^{res} \approx \frac{(k_0^2 + q_0^2)L}{4k_0 q_0^2}. \quad (3.6)$$

Na região $(0, L)$ a componente com momento positivo aparece em torno de $x = 0$ com um tempo de atraso

$$\Delta t_A = \frac{1}{2k_0} \left[\left. \frac{\partial \lambda(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0} - L \left. \frac{\partial q(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} \right] = \Delta t_{ref} - \frac{L}{2k_0} \left. \frac{\partial q(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} = \Delta t_{ref} - \frac{L}{2q_0}, \quad (3.7)$$

de modo que para k_0 próximo do valor ressonante segue

$$\Delta t_A^{res} = \Delta t_{ref}^{res} - \frac{L}{2q_0} \approx \frac{(k_0 - q_0)^2 L}{4k_0 q_0} > 0 \quad .$$

O pico associado a Ψ_A percorre livremente a distância L obedecendo a uma dinâmica análoga àquela da partícula livre, ou seja, descrita através do MFE aplicado à fase $q(k)x - 2kt$, cuja derivada em k_0 fornece velocidade de grupo $2q_0$, o que resulta em um tempo $L/2q_0$ gasto entre 0 e L . Assim, observando a equação (3.7), o pico do pacote de onda associado a Ae^{iqx} encontra $x = L$ após um tempo de atraso $\Delta t_A = \Delta t_{ref}$. O MFE também informa que o pico associado à componente de momento negativo sobre a barreira é encontrado em $x = L$ com atraso de

$$\Delta t_B = \Delta t_{ref} = \frac{1}{2k_0} \left. \frac{\partial \lambda(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0}$$

e em $x = 0$ após $\Delta t_{ref} + L/2q_0$.

Conclui-se das observações acima que $\Delta t_B^{res} = \Delta t_{ref}^{res} > \Delta t_A^{res} > 0$. Além disso, é fácil ver que a onda transmitida seria encontrada no ponto $x = L$ com um tempo de atraso $\Delta t_{tra} = \Delta t_{ref}$. Assim, entre a incidência do pico na barreira em $t = 0$ e o primeiro surgimento de um ponto de máximo em $\Delta t_A^{res} < \Delta t_r^{res} = \Delta t_B^{res} = \Delta t_t^{res}$ nenhum pico é encontrado, fato claramente contraditório no que diz respeito à conservação de probabilidade. Além disso, seria natural esperar que os tempos e probabilidades obtidos com o crescimento indefinido de L fossem fisicamente coerentes com os resultados do degrau de potencial, $V(x) = 1 \forall x \in [0, +\infty)$. Segundo estes, não há transmissão total e o tempo de reflexão é instantâneo. Porém, da equação (3.2) segue $|R(k_0, L)| = 0$ para $q_0 = n\pi, n \in \mathbb{N}$, e os tempos expostos acima prevêm atraso na reflexão. De qualquer maneira, convém notar que tais probabilidades dadas por $|R|$ e $|T|$ são referentes às ondas planas e só podem ter relação com pacotes de onda quando estes forem muito largos espacialmente, como fica claro na seção seguinte.

3.2 Difusão de múltiplos picos

Simulações numéricas da evolução dos pacotes estreitos em relação à largura da barreira sugerem múltiplas difusões (figura 7). De fato, considerando as soluções válidas em $(0, L)$, é natural esperar que cada interface de descontinuidade da barreira provoque probabilidades de propagação com componentes de momento opostas e, desde que ela tenha dimensões

que permitam o distanciamento entre cada pico, há relevante distanciamento entre os pacotes de onda formados.

Após o encontro com a barreira, um pacote de onda incidente se divide em um pacote refletido em $(-\infty, 0)$ e outro sobre a região $(0, L)$, que por sua vez será desmembrado na fronteira $x = L$ em uma componente transmitida em $(L, +\infty)$ e outra com momento negativo novamente em $(0, L)$, cujo encontro da fronteira $x = 0$ provoca uma segunda componente refletida em $(-\infty, 0)$. Múltiplas difusões como estas fornecem múltiplos picos. O MFE foi aplicado até aqui considerando a existência de pico únicos em cada região, o que violou a conservação de probabilidade.

Nesse contexto, deve-se investigar o que acontece com a continuidade das soluções estacionárias e suas derivadas em $x = 0$ e $x = L$, analisadas, porém, em uma série de coeficientes com termos gerais R_n, T_n, A_n, B_n , onde as condições de continuidade são aplicadas para $n = 1, 2, 3, \dots$. Para a primeira componente refletida, a continuidade em relação a $A_1 e^{iqx}$ e à onda incidente em $x = 0$ implica

$$\begin{cases} e^{ik \cdot 0} + R_1 e^{-ik \cdot 0} &= A_1 e^{iq \cdot 0} \\ ik e^{ik \cdot 0} - ik R_1 e^{-ik \cdot 0} &= iq A_1 e^{iq \cdot 0} \end{cases}, \quad (3.8)$$

o que descreve a decomposição da onda incidente em uma componente refletida e outra com momento positivo na região $(0, L)$. Segue das equações (3.8) que

$$R_1 = \frac{k - q}{k + q} \quad \text{e} \quad A_1 = \frac{2k}{k + q}.$$

O pacote de onda referente ao coeficiente B contribui na formação de uma segunda componente refletida, além de ocorrer superposição com o pacote de onda associado a $A_1 e^{iqx}$, presente em $(0, L)$ e transmitido em $[L, +\infty)$. Sendo assim, as condições de continuidade ficam escritas como

$$\begin{cases} A_1 e^{iqL} + B_1 e^{-iqL} &= T_1 e^{ikL} \\ iq A_1 e^{iqL} - iq B_1 e^{-iqL} &= ik T_1 e^{ikL} \end{cases} \quad (3.9)$$

e

$$\begin{cases} A_2 e^{iq \cdot 0} + B_1 e^{-iq \cdot 0} &= R_2 e^{-ik \cdot 0} \\ iq A_2 e^{iq \cdot 0} - iq B_1 e^{-iq \cdot 0} &= -ik R_2 e^{-ik \cdot 0} \end{cases}, \quad (3.10)$$

que fornecem

$$T_1 = \frac{4kq}{(k+q)^2} e^{i(q-k)L} \quad , \quad B_1 = A_1 \frac{(q-k)}{(k+q)} e^{2iqL} = \frac{2k(q-k)}{(k+q)^2} e^{2iqL}$$

e

$$R_2 = B_1 \frac{2q}{(k+q)} = \frac{4kq(q-k)}{(k+q)^3} e^{2iqL} \quad , \quad A_2 = A_1 \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \quad .$$

As n -ésimas e $(n+1)$ -ésimas componentes de transmissão e reflexão obedecem, respectivamente, às relações

$$\begin{cases} A_n e^{iqL} + B_n e^{-iqL} &= T_n e^{ikL} \\ iq A_n e^{iqL} - iq B_n e^{-iqL} &= ik T_n e^{ikL} \end{cases} \quad , \quad (3.11)$$

$$\begin{cases} A_{n+1} e^{iq,0} + B_n e^{-iq,0} &= R_{n+1} e^{-ik,0} \\ iq A_{n+1} e^{iq,0} - iq B_n e^{-iq,0} &= -ik R_{n+1} e^{ik,0} \end{cases} \quad ,$$

que juntamente com as equações (3.8) fornecem, recursivamente, os coeficientes R_n, T_n, B_n e A_n para todo $n \in \mathbb{N}$ em função de (k, L) . A partir das equações (3.11) se extraem as relações de recorrência $A_{n+1} = A_{n+1}(B_n(A_n))$, $B_{n+1} = B_{n+1}(A_{n+1}(B_n))$, $R_{n+1} = R_{n+1}(B_n(A_n))$ e $T_{n+1} = T_{n+1}(A_{n+1}(B_n))$, onde $A_n = A_n(R_n)$ e $B_n = B_n(T_n)$ implicam $R_{n+1} = R_{n+1}(R_n)$ e $T_{n+1} = T_{n+1}(T_n)$. Dado $n_0 \in \mathbb{N}$, as duas primeiras equações de (3.11) ficam escritas como

$$\begin{cases} T_{n_0} &= A_{n_0} e^{i(q-k)L} + B_{n_0} e^{-i(q+k)L} \\ ik T_{n_0} &= iq A_{n_0} e^{i(q-k)L} - iq B_{n_0} e^{-i(q+k)L} \end{cases}$$

 \Rightarrow

$$ik A_{n_0} e^{iqL} + ik B_{n_0} e^{-iqL} = iq A_{n_0} e^{iqL} - iq B_{n_0} e^{-iqL}$$

de onde segue

$$B_{n_0} = A_{n_0} \frac{(q-k)}{(q+k)} e^{2iqL} \quad .$$

Por outro lado, as duas últimas equações em (3.11) fornecem

$$A_{n_0+1} + B_{n_0} = -\frac{q}{k} A_{n_0+1} + \frac{q}{k} B_{n_0}$$

 \Leftrightarrow

$$A_{n_0+1} = \frac{(q-k)}{(q+k)} B_{n_0} \quad .$$

Logo,

$$A_{n_0+1} = A_{n_0} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \quad .$$

Analogamente, obtém-se resultado idêntico para T_{n_0}, R_{n_0} e B_{n_0} . Como n_0 foi tomado arbitrariamente, segue que

$$\frac{R_{n+2}}{R_{n+1}} = \frac{A_{n+1}}{A_n} = \frac{B_{n+1}}{B_n} = \frac{T_{n+1}}{T_n} = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

onde a diferença do índice dos coeficientes de reflexão se deve à equação (3.8), única expressão que considera a continuidade em relação à incidência.

É razoável considerar as probabilidades dadas por superposições do múltiplos pacotes de onda. Tomando, por exemplo, a série formada pelos elementos de (A_n) ,

$$\sum_{n=1}^{\infty} A_n = A_1 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{(n-1)} = A_1 \sum_{m=0}^{\infty} \left[\left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^m ,$$

onde

$$\left| \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right| = \left| \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 \right| < 1 ,$$

pois $k > q(k) > 0$, segue que a série construída acima é convergente e

$$A(k; L) := \sum_{n=1}^{\infty} A_n = A_1 \left[1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{-1} .$$

Analogamente,

$$R(k; L) := \sum_{n=1}^{\infty} R_n = R_1 + R_2 \left[1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{-1} ,$$

$$B(k; L) := \sum_{n=1}^{\infty} B_n = B_1 \left[1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{-1} ,$$

$$T(k; L) := \sum_{n=1}^{\infty} T_n = T_1 \left[1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{-1} .$$

As equações acima reproduzem exatamente as expressões dadas em (3.2). Por exemplo, o coeficiente T fica escrito explicitamente como

$$\begin{aligned}
T(k; L) &= \frac{4kq e^{-ikL}}{(k+q)^2 e^{-iqL} \left[1 - \frac{(k-q)^2}{(k+q)^2} e^{2iqL} \right]} \\
&= \frac{4kq e^{-ikL}}{(k+q)^2 e^{-iqL} - (k-q)^2 e^{iqL}} = \frac{e^{-ikL}}{\cos(qL) - i \frac{(k^2+q^2)}{2kq} \sin(qL)} = \\
&= \frac{e^{i\lambda(k;L) - ikL}}{[\cos^2(qL) + \frac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2} \sin^2(qL)]^{1/2}} = \frac{2kq e^{i\lambda(k;L) - ikL}}{[4k^2q^2 + \sin^2(qL)]^{1/2}} ,
\end{aligned}$$

expressão idêntica àquela obtida anteriormente. Facilmente se demonstra o mesmo para os outros coeficientes. Assim, as funções R, T, A e B podem ser escritas como pontos de convergência das séries formadas pelos coeficientes das múltiplas funções de onda.

No que diz respeito às probabilidades, é fácil provar que $|R|^2 + |T|^2 \equiv 1$. No entanto, é preciso considerar a validade física de tal igualdade. Para cada n -ésima componente pode-se formar um pacote de onda. Quando L não é grande o suficiente para distingui-los, eles se superpõe formando picos singulares associados aos pacotes dados por R e T (relativamente ao potencial, o pacote de onda incidente parece uma onda plana). No entanto, quando a largura da barreira é grande em relação a Δx_{inc} ao ponto de permitir importante separação entre os n -ésimos picos, faz sentido calcular as probabilidades separadamente:

$$\text{Probabilidade}_{R_n} := \sum_{n=1}^{\infty} |R_n|^2, \quad \text{Probabilidade}_{T_n} := \sum_{n=1}^{\infty} |T_n|^2.$$

Quanto à conservação de probabilidade segue

$$\sum_{n=1}^{\infty} [|R_n|^2 + |T_n|^2] = |R_1|^2 + |T_1|^2 + |R_2|^2 + |T_2|^2 + \sum_{n=3}^{\infty} \left[(|R_2|^2 + |T_2|^2) \left| \left[\left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{(n-2)} \right|^2 \right],$$

onde

$$\left| \left[\left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 e^{2iqL} \right]^{(n-2)} \right|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^{4(n-2)}$$

e, portanto,

$$\text{Probabilidade}_{R_n} + \text{Probabilidade}_{T_n} = |R_1|^2 + |T_1|^2 + |R_2|^2 + |T_2|^2 + (|R_2|^2 + |T_2|^2) \sum_{n=3}^{\infty} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^{4(n-2)}.$$

O somatório da expressão acima pode ser reescrito levando-se em conta a relação $k - q(k) <$

$k + q(k)$, de modo que

$$\sum_{n=3}^{\infty} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^{4(n-2)} = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^{4m} = \frac{1}{1 - \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^4} - 1 = \frac{(k+q)^4}{(k+q)^4 - (k-q)^4} - 1, \quad ,$$

resultando em

$$\sum_{n=1}^{\infty} [|R_n|^2 + |T_n|^2] = |R_1|^2 + |T_1|^2 + (|R_2|^2 + |T_2|^2) \frac{(k+q)^4}{(k+q)^4 - (k-q)^4}, \quad ,$$

cujos termos ficam dados explicitamente por

$$\begin{aligned} |R_1|^2 + |T_1|^2 &= \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^2 + \frac{16k^2q^2}{(k+q)^4} = \frac{(k^2 - q^2)^2 + 16k^2q^2}{(k+q)^4}, \quad , \\ (|R_2|^2 + |T_2|^2) \frac{(k+q)^4}{(k+q)^4 - (k-q)^4} &= \left[\frac{16k^2q^2(k-q)^2}{(k+q)^6} + \frac{16k^2q^2(k-q)^4}{(k+q)^8} \right] \frac{(k+q)^4}{(k+q)^4 - (k-q)^4}, \quad , \\ &= \frac{32k^2q^2(k-q)^2(k^2 + q^2)}{(k+q)^8} \frac{(k+q)^4}{(k+q)^4 - (k-q)^4} = \frac{4kq(k-q)^2}{(k+q)^4} \end{aligned}$$

de onde segue

$$\text{Probabilidade}_{R_n} + \text{Probabilidade}_{T_n} = \frac{(k^2 - q^2)^2 + 16k^2q^2 + 4kq(k-q)^2}{(k+q)^4}, \quad ,$$

cujos numerador pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} (k^2 - q^2)^2 + 16k^2q^2 + 4kq(k-q)^2 &= k^4 + q^4 - 2k^2q^2 + 16k^2q^2 + 4k^3q + 4kq^3 - 8k^2q^2 \\ &= k^4 + q^4 + 6k^2q^2 + 4k^3q + 4kq^3 = (k+q)^4 \end{aligned} \quad .$$

Portanto, Probabilidade _{R_n} + Probabilidade _{T_n} $\equiv 1$. Ou seja, a abordagem de múltipla difusão obedece à conservação de probabilidade. Ela também é perfeitamente coerente com simulações numéricas desenvolvidas. Como pode ser mostrado numericamente [42], as funções descritas pelos n -ésimos pacotes concordam com àquelas dadas diretamente pelos coeficientes totais R e T .

O MFE deve considerar a possibilidade de fases decompostas, uma vez que a limitação da aplicação do mesmo à fase do coeficiente total de uma somatória complexa não é equivalente à consideração de cada termo separadamente. Ou seja, dados $z, w \in \mathbb{C}$, é preciso aplicar o MFE para cada fase de z e w , ao invés de simplesmente tomar a composição de $(z + w)$. Sendo assim, em nenhum momento há ausência de picos. De fato, as derivadas das fases de $R_1 e^{ikx}$ e $A_1 e^{iqx}$ igualadas a zero informam que picos de pacotes de ondas associados

a estas funções aparecem em $x = 0$ para $t = 0$, ou seja, a decomposição da onda incidente na barreira ocorre instantaneamente. Além disso, para a primeira componente transmitida $T_1 e^{ikx}$ o MFE fornece um tempo $L/2q_0$ para o surgimento do pico em $x = L$, precisamente o mesmo instante em que os picos associados a $A_1 e^{iqx}$ e $B_1 e^{-iqx}$ se encontram em tal fronteira. É fácil verificar numericamente tal dinâmica, assim como para tempos maiores, confirmando a validade do MFE (basta, por exemplo, acompanhar as posições dos máximos na figura 7). No entanto, deve-se levar em conta de que o mesmo é mais preciso à medida que se toma uma distribuição de momento estreita.

A múltipla difusão restaura uma coerência importante em relação ao degrau de potencial: é fácil observar via integração numérica que as probabilidades de transmissão dadas por pacotes de ondas tendem a um valor constante com o crescimento indefinido da largura da barreira. De fato, neste limite é válido tomar

$$\text{Probabilidade}_{T_n} = \sum_{n=1}^{\infty} |T_n(k; L, D)|^2 = \frac{16k^2 q^2}{(k+q)^4} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{k-q}{k+q} \right)^{4(n-1)} = \frac{2kq}{k^2 + q^2} < 1 \quad \forall k > 1,$$

que é independente de L . Há presença de ressonância somente no caso de "ondas planas" quando $d \gg Lk_0/q_0$. Nesta situação, os múltiplos pacotes estão em superposição praticamente total e a probabilidade fica dada por $|T|^2$, não havendo sentido na consideração do degrau como caso limite, tampouco incoerência na observação de $|T(k_0, L)| = 1$.

Capítulo 4

Tunelamento Através De Duas Barreiras

Neste capítulo apresenta-se a fenomenologia do tunelamento via uma dupla de barreiras. Utiliza-se interpretação física e técnicas análogas àquelas do capítulo anterior: múltiplos picos. Tal característica dos pacotes de onda envolvidos são relacionados às dimensões do potencial, a saber, largura das barreiras e distância de separação entre as mesmas.

Em se tratando de tempo de transmissão, intuitivamente se espera que haja dependência em relação à largura (já verificada para uma barreira, capítulo 2) e distância. É o que fica evidenciado através da multiplicidade dos picos e sua concordância com o Método da Fase Estacionária. Outra questão importante diz respeito a efeitos de ressonância. Dado que a probabilidade de transmissão através de uma barreira nunca é total, pode causar estranheza o fato de que a presença de uma segunda barreira com mesma largura e particular distância em relação à primeira fornece ressonância. De fato, tal fenômeno ocorre apenas no limite de pacotes de onda incidentes largos em relação ao potencial.

Para efeitos de simplificação dos cálculos, o potencial tratado neste capítulo possui duas barreiras com mesma largura, não havendo perda de generalidade relevante.

4.1 Potencial de duas barreiras

Seja o potencial de barreiras idênticas separadas por uma distância D :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in (-\infty, 0] \cup [L, L+D] \cup [2L+D, +\infty) \\ 1 & x \in (0, L) \cup (L+D, 2L+D) \end{cases} . \quad (4.1)$$

Para uma partícula incidindo sobre V vinda da esquerda com $E(k) = k^2 < 1$, as soluções estacionárias da equação de Schrödinger são dadas por

$$\begin{aligned}
 \varphi_1(x, k; L, D) &= e^{ikx} + R^{(2)}(k; L, D) e^{-ikx} & x \leq 0 \\
 \varphi_2(x, k; L, D) &= b(k; L, D) e^{\rho(k)x} + b'(k; L, D) e^{-\rho(k)x} & 0 < x < L \\
 \varphi_3(x, k; L, D) &= A(k; L, D) e^{ikx} + A'(k; L, D) e^{-ikx} & L \leq x \leq L + D \\
 \varphi_4(x, k; L, D) &= c(k; L, D) e^{\rho(k)x} + c'(k; L, D) e^{-\rho(k)x} & L + D < x < 2L + D \\
 \varphi_5(x, k; L, D) &= T^{(2)}(k; L, D) e^{ikx} & x \geq 2L + D \quad ;
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

com $\rho(k) = \sqrt{1 - k^2}$. Definindo

$$W[\lambda, x] := \begin{pmatrix} e^{\lambda x} & e^{-\lambda x} \\ \lambda e^{\lambda x} & -\lambda e^{-\lambda x} \end{pmatrix}$$

e

$$\Delta[\lambda x] := \begin{pmatrix} e^{\lambda x} & 0 \\ 0 & e^{-\lambda x} \end{pmatrix} \quad ,$$

as condições de continuidade das funções φ_i , $i = 1, \dots, 5$ e suas derivadas nos pontos de descontinuidade de V fornecem

$$\begin{aligned}
 W[ik, 0] \begin{pmatrix} 1 \\ R^{(2)} \end{pmatrix} &= W[\rho, 0] \begin{pmatrix} b \\ b' \end{pmatrix} \quad , \\
 W[\rho, L] \begin{pmatrix} b \\ b' \end{pmatrix} &= W[ik, L] \begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} \quad , \\
 W[ik, (L + D)] \begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} &= W[\rho, (L + D)] \begin{pmatrix} c \\ c' \end{pmatrix} \quad , \\
 W[\rho, (2L + D)] \begin{pmatrix} c \\ c' \end{pmatrix} &= W[ik, (2L + D)] \begin{pmatrix} T^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad .
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

de onde segue que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R^{(2)} \end{pmatrix} = W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] W^{-1}[\rho, L] W[ik, L] W^{-1}[ik, L + D] \cdot \\ \cdot W[\rho, L + d] W^{-1}[\rho, 2L + D] W[ik, 2L + D] \begin{pmatrix} T^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Usando as relações $W[\lambda, x] = W[\lambda, 0] \Delta[\lambda x]$, $W^{-1}[\lambda, 0] = \frac{1}{2} W^T[\lambda^{-1}, 0]$ e $\Delta^{-1}[\lambda x] = \Delta[-\lambda x]$ e definindo

$$M = M[k, \rho; L, d] := \Delta[-ikd] W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] \Delta[-\rho L] W^{-1}[\rho, 0] W[ik, 0] \quad , \quad (4.4)$$

obtem-se a expressão

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R^{(2)} \end{pmatrix} = \Delta[ikd] M^2 \Delta[ik(2L + D)] \begin{pmatrix} T^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (4.5)$$

Quando $D = 0$ em (4.5) se tem a equação matricial para o caso de uma barreira de comprimento $2L$, como era de se esperar.

Sejam os elementos de $M \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ denotados por M_{ij} , a multiplicação de matrizes na equação (4.4) fornece

$$\begin{aligned} M_{11}(k; L, D) &= [\cosh(\rho L) + i \frac{(\rho^2 - k^2)}{2k\rho} \sinh(\rho L)] e^{-ikD} = M_{22}^*(k; L, D) \quad , \\ M_{21}(k; L, D) &= -i \frac{(k^2 + \rho^2)}{2k\rho} \sinh(\rho L) e^{ikD} = M_{12}^*(k; L, D) \quad . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Denotando $M_{11} = F$ e $M_{21} = G$,

$$M = \begin{pmatrix} F & G^* \\ G & F^* \end{pmatrix}$$

onde

$$F = \cosh(\rho L) \left[1 + \left(\frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \right)^2 \tanh^2(\rho L) \right]^{1/2} e^{-i(\alpha(k; L) + kD)} \quad ,$$

$$G = \frac{\cosh(\rho L)}{\cos \alpha(k; L)} e^{-i(\alpha(k; L) + kD)} \quad ;$$

$$\alpha(k; L) = \arctan \left\{ \frac{(2k^2 - 1)}{2k\sqrt{1 - k^2}} \tanh(\sqrt{1 - k^2} L) \right\} \in \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right)$$

tal que as expressões para os coeficientes de transmissão e reflexão unidimensionais $T(k; L)$

e $R(k; L)$ (equações 2.9) permitem escrever

$$F(k; L, D) = \frac{e^{-ik(L+D)}}{T(k; L)} = \frac{e^{-ik(L+D)}}{|T(k; L)|e^{i(\alpha(k; L)-kL)}} = \frac{e^{-i(kD+\alpha(k; L))}}{|T(k; L)|} \quad (4.7)$$

e

$$G(k; L, D) = \frac{R(k; L)}{T(k; L)} e^{ikD} e^{-ikL} = -i \frac{|R(k; L)|}{|T(k; L)|} e^{ikD} \quad (4.8)$$

De (4.5) segue que $1 = (F^2 + GG^*)T^{(2)} e^{2ik(L+D)}$. Isolando $T^{(2)}$ e substituindo as expressões de F e G dadas por (4.7) e (4.8) obtém-se

$$T^{(2)}(k; L, D) = \frac{T^2(k; L)}{1 - R^2(k; L) e^{2ikD}} \quad (4.9)$$

cuja forma polar é dada por

$$T^{(2)}(k; L, D) = \frac{|T(k; L)|^2 e^{-i\theta(k; L, D)} e^{2i(\alpha(k; L)-kL)}}{[1 + 2|R(k; L)|^2 \cos 2\phi(k; L, D) + |R(k; L)|^4]^{1/2}},$$

onde

$$\theta(k; L, D) = \arctan \left\{ \frac{|R(k; L)|^2 \sin 2\phi(k; L, D)}{1 + |R(k; L)|^2 \cos 2\phi(k; L, D)} \right\}, \quad \phi(k; L, D) := \alpha(k; L) + kD. \quad (4.10)$$

Além disso, a expressão (4.5) também fornece $R^{(2)} = T^{(2)} G(F + F^*) e^{2ikL}$. Assim,

$$R^{(2)}(k; L, D) = \frac{T^2(k; L)}{1 - R^2(k; L) e^{2ikD}} \frac{R(k; L)}{T(k; L)} \left(\frac{e^{-ik(L+D)}}{T(k; L)} + \frac{e^{ik(L+D)}}{T^*(k; L)} \right) e^{ik(L+D)}, \quad (4.11)$$

$$R^{(2)}(k; L, D) = R(k; L) + \frac{R(k; L)T^2(k; L) e^{2ik(L+D)}}{1 - R^2(k; L) e^{2ik(L+D)}},$$

de modo que

$$R^{(2)}(k; L, D) = \frac{-i|R(k; L, D)|(1 + e^{2i\phi(k; L)}) e^{i\alpha(k; L)} e^{-i\theta(k; L, D)}}{[1 + 2|R(k; L)|^2 \cos 2\phi(k; L, D) + |R(k; L)|^4]^{1/2}}. \quad (4.12)$$

Verifica-se facilmente que as equações (4.10) e (4.12) satisfazem $|R^{(2)}(k; L, D)|^2 + |T^{(2)}(k; L, D)|^2 = 1$. Também se pode notar algo espantoso, à primeira vista:

$$|T^{(2)}(k; L, D)|^2 = 1 \quad \text{quando} \quad \cos 2\phi(k; L, D) = -1 \quad ,$$

ou seja, para valores específicos de L (pequenos) e D há transmissão total (ressonância), o que nunca ocorre na ausência da segunda barreira ($|T| < 1$). A razão pela qual tal fato ocorre fica clara através da abordagem feita na seção seguinte.

4.2 Multiplicidade de picos

Para D pequeno em relação à largura do pacote de onda incidente, as funções Ae^{ikx} e $A'e^{-ikx}$ fornecem picos bem definidos percorrendo a região livre $[L, L+D]$ e interagindo com as barreiras produzindo sucessivas reflexões e transmissões. Um pacote de onda transmitido através da primeira barreira (A_1) produz uma componente referente à probabilidade de reflexão (A'_1) e outra à transmissão (T_1) quando incide em $x \simeq L+D$. Aquela refletida, por sua vez, terá momento negativo incidindo da direita para a esquerda sobre a primeira barreira, fornecendo uma função transmitida em $(-\infty, 0]$ (R_2) e outra refletida (A_2) com momento positivo indo de encontro à segunda barreira, de onde surge uma segunda componente de transmissão (T_2) em $[2L+D, +\infty)$. Essas múltiplas reflexões e transmissões entre as barreiras ocorrem indefinidamente produzindo múltiplos picos em $[2L+D, +\infty)$ e $(-\infty, 0]$.

É possível obter seqüências de coeficientes (T_n), (R_n) e outras de maneira construtiva. A dinâmica de reflexões e transmissões descrita acima e os coeficientes dados por (2.9) e (2.11) permitem calcular explicitamente cada termo de uma seqüência de picos ao considerá-los individualmente como parte das soluções do problema de uma barreira, já conhecidas. Ou seja, olha-se o problema de duplo tunelamento como uma seqüência de interações de cada componente com uma barreira.

O primeiro pico incidente sobre a primeira barreira está associado às ondas planas que descrevem soluções estacionárias da equação de Schrödinger dadas por

$$\begin{cases} e^{ikx} + R_1(k; L)e^{-ikx} & x \leq 0 \\ b_1(k; L)e^{\rho(k)x} - b'_1(k; L)e^{-\rho(k)x} & 0 < x < L \\ A_1(k; L)e^{ikx} & L \leq x \leq 2L+D \end{cases} ,$$

cujas formas são idênticas às soluções da barreira de potencial única, onde $R_1(k; L) = R(k; L) :=$

$R(k; a = 0, b = L)$, de modo que as condições de continuidade em 0 e L fornecem

$$A_1(k; L) = T(k; L) \quad ,$$

dado por (2.9). Por sua vez, a onda $A_1 e^{ikx}$ encontra a segunda barreira fornecendo soluções da forma

$$\begin{cases} A_1(k; L)e^{ikx} + A'_1(k; L, D)e^{-ikx} & x \leq L + D \\ c_1(k; L)e^{\rho(k)x} - c'_1(k; L, D)e^{-\rho(k)x} & L + D < x < 2L + D \\ T_1(k; L)e^{ikx} & x \geq 2L + D \end{cases} \quad ,$$

novamente idêntica àquela da barreira única, com exceção de um coeficiente $A_1(k; L)$ multiplicando as soluções. Portanto,

$$T_1(k; L) = A_1(k; L)T(k; L) = T^2(k; L) \quad . \quad (4.13)$$

A componente refletida, por sua vez, fica dada por

$$A'_1(k; L, D) = A_1(k; L)R(k; L + D, 2L + D) = A_1(k; L)R(k; L)e^{2ik(L+D)} = T(k; L)R(k; L)e^{2ik(L+D)} \quad . \quad (4.14)$$

A incidência de $A'_1(k; L)e^{-ikx}$ sobre a primeira barreira está associada às soluções

$$\begin{cases} A'_1(k; L, D)e^{-ikx} + A_2(k; L, D)e^{ikx} & x \geq L \\ b_2(k; L, D)e^{\rho(k)x} - b'_2(k; L, D)e^{-\rho(k)x} & 0 < x < L \\ R_2(k; L, D)e^{-ikx} & x \leq 0 \end{cases} \quad ,$$

onde $A_2(k; L, D) = A'_1(k; L, D)R_-(k; 0, L) = A'_1(k; L, D)R(k; L)e^{-2ikL} = T(k; L)R^2(k; L)e^{2ikD}$ e

$$R_2(k; L, D) = A'_1(k; L, D)T_-(k; L) = T^2(k; L)R(k; L)e^{2ik(L+D)} \quad . \quad (4.15)$$

O encontro de $A_2(k; L, D)e^{ikx}$ com a segunda barreira satisfaz

$$\begin{cases} A_2(k; L, D)e^{ikx} + A'_2(k; L, D)e^{-ikx} & x \leq L + D \\ c_2(k; L, D)e^{\rho(k)x} - c'_2(k; L, D)e^{-\rho(k)x} & L + D < x < 2L + D \\ T_2(k; L, D)e^{ikx} & x \geq 2L + D \end{cases} \quad ,$$

de onde segue

$$T_2(k; L, D) = T^2(k; L)R^2(k; L)e^{2ikD} \quad . \quad (4.16)$$

A sistemática da obtenção dos coeficientes motiva definir

$$R_1(k; L) = R(k; L) \quad , \quad R_n(k; L, D) := R(k; L) T^2(k; L) e^{2ik(L+D)} \left(R^2(k; L) e^{2ikD} \right)^{n-2} \quad \forall n > 1 \quad , \quad (4.17)$$

$$T_n(k; L, D) := T^2(k; L) R^{2(n-1)}(k; L) e^{2i(n-1)kD} \quad \forall n \quad , \quad (4.18)$$

e

$$\begin{aligned} R^{(2)}(k; L, D) &:= \sum_{n=1}^{\infty} R_n(k; L, D) = R(k; L) \left[1 + T^2(k; L) e^{2ik(L+D)} \sum_{n=0}^{\infty} \left(R^2(k; L) e^{2ikD} \right)^n \right] \\ &= R(k; L) + \frac{R(k; L) T^2(k; L) e^{2ik(L+D)}}{1 - R^2(k; L) e^{2ikD}} \quad , \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$T^{(2)}(k; L, D) := \sum_{n=1}^{\infty} T_n(k; L, D) = T^2(k; L) \sum_{n=0}^{\infty} \left(R^2(k; L) e^{2ikD} \right)^n = \frac{T^2(k; L)}{1 - R^2(k; L) e^{2ikD}} \quad , \quad (4.20)$$

cujas convergências seguem do fato que $|R|^2 < 1$. Os coeficientes acima concordam com aqueles das expressões (4.9) e (4.11).

Os termos $(R^2(k; L) e^{2ikD})^n$ representam as múltiplas reflexões causadas pela interação com as duas barreiras quando a partícula encontra-se em $[L, L + D]$. Quando D é grande o suficiente relativamente a Δx_{inc} para que haja clara distinção entre os n -ésimos pacotes, são produzidos múltiplos picos transmitidos e refletidos bem separados entre si. Neste caso, faz sentido calcular as probabilidades de encontrar cada um separadamente, de modo que as probabilidades de observar reflexão e transmissão ficam dadas por

$$\begin{aligned} P_{R, \text{partícula}}(k; L) &= |R(k; L)|^2 + |R(k; L)|^2 |T(k; L)|^4 \sum_{n=0}^{\infty} |R(k; L)|^{4n} = \frac{2|R(k; L)|^2}{1 + |R(k; L)|^2} \quad , \\ P_{T, \text{partícula}}(k; L) &= |T(k; L)|^4 \sum_{n=0}^{\infty} |R(k; L)|^{4n} = \frac{|T(k; L)|^2}{1 + |R(k; L)|^2} \quad , \end{aligned} \quad (4.21)$$

tais que

$$P_{R, \text{partícula}} + P_{T, \text{partícula}} \equiv 1 \quad ,$$

onde se usa $|T|^2 + |R|^2 \equiv 1$ e o nome “partícula” se refere à idéia física de pacotes estreitos e picos bem destacados entre si.

Por outro lado, quando a separação entre as barreiras não é grande o suficiente para haver distinção relevante entre as múltiplas reflexões e transmissões, pode-se considerar picos únicos em ambos os casos, ou seja, superposição total entre os n -ésimos pacotes de

onda (ondas planas satisfazem tal condição). Neste caso, as probabilidades ficam dadas pelos coeficientes (4.19), (4.20) e se escrevem como

$$P_{R,\text{onda}}(k; L, D) = |R^{(2)}(k; L, D)|^2 = \frac{2|R(k; L)|^2[1 + \cos 2\phi(k; L, D)]}{1 + 2|R(k; L)|^2 \cos 2\phi(k; L, D) + |R(k; L)|^4} , \quad (4.22)$$

$$P_{T,\text{onda}}(k; L, D) = |T^{(2)}(k; L, D)|^2 = \frac{|T(k; L)|^4}{1 + 2|R(k; L)|^2 \cos 2\phi(k; L, D) + |R(k; L)|^4} , \quad (4.23)$$

também satisfazendo

$$P_{R,\text{onda}} + P_{T,\text{onda}} \equiv 1$$

É importante salientar que o acréscimo na largura da barreira privilegia a transmissão de componentes com maior energia, incrementando a largura do pacote transmitido (através de ambas as barreiras) devido à restrição no espectro de momento. Assim, barreiras muito largas tendem a inibir a evidência de múltiplos picos em $[L, L+D]$ e $[2L+D, +\infty)$, provocando superposição entre os pacotes de onda.

Em relação aos valores de ressonância, nota-se que ela só existe no caso do limite ondular. De fato,

$$P_{T,\text{partícula}}(k; L) = \frac{1 - |R(k; L)|^2}{1 + |R(k; L)|^2} < 1 \quad \forall L ,$$

para cada k fixo. Ou seja, além da necessidade de barreiras finas, a transmissão total só pode ocorrer com D pequeno em relação a Δx_{inc} . Fisicamente, o pacote de onda incidente deve ser muito grande em relação ao potencial (4.1) e a constatação de ressonância não surpreende.

4.3 Transição entre unicidade e multiplicidade de picos

Na seção anterior expôs-se analiticamente o comportamento de casos limites para o problema de um pacote de onda incidente vindo da esquerda sobre o potencial (4.1). Con-vém avaliar numericamente a transição da fenomenologia entre as situações “ondular” e de “partícula”.

Na figura 8.a fixa-se L em um valor pequeno em relação às diferentes larguras dos pacotes incidentes. Observa-se nos gráficos o comportamento das probabilidades de transmissão em função da separação entre barreiras. Observando a fórmula de Parseval-Plancherel, tais

probabilidades são dadas explicitamente por

$$\frac{d}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 |T^{(2)}(k; L, D)|^2 e^{-d^2(k-k_0)^2/2} dk ,$$

que tendem para o valor constante $P_{R,\text{partícula}}(k_0; L)$ à medida que D cresce (permitindo múltiplos picos). Por outro lado, nota-se que para pequena separação entre as barreiras o comportamento é mais similar àquele da probabilidade calculada via ondas planas, para a qual $|T^{(2)}(k; L, D)|^2$ assume valor 1 com D 's específicos. Nota-se também outro comportamento esperado: pacotes de onda incidentes mais largos exigem maior separação entre as barreiras a fim de se aproximar de $P_{R,\text{partícula}}(k_0; L)$ (anulamento das oscilações). Isso se deve ao fato de que estes produzem pacotes de onda transmitidos mais largos na região $[L, L+D]$, onde se produzem as múltiplas reflexões e transmissões.

Para $d = 2\Delta x_{inc}$ fixo, na figura 8.b evidencia-se que o comportamento típico de ondas planas é aproximado apenas por barreiras muito finas, não obstante haver maior superposição dos múltiplos pacotes devido à restrição de transmissão à componentes de maior momento.

Com relação aos tempos de transmissão, há possibilidade de prevê-los analiticamente via MFE para o caso limite de múltiplos picos, onde o mesmo é aplicado a cada um individualmente. A figura 9 mostra que a posição do máximo é prevista com precisão para o MFE calculado nos valores médios de momento transmitidos \hat{k} (análogos à equação (2.17)). Existe dependência explícita em relação a L e D , como se pode ver nas fase de T_n (equações (4.13), (4.16) e (4.18)). No caso de T_1 , a dependência em relação a D aparece quando se procura calcular o tempo de transmissão para $x_{tra}^M = 2L + D$.

Capítulo 5

Barreira Dielétrica

Neste capítulo investiga-se a propagação de uma onda elétrica transversal através de uma barreira dielétrica em um meio estratificado. Observa-se similaridades entre as equações de Schrödinger e da onda elétrica, de onde segue a relevância da presente exposição perante os resultados obtidos para difusão e tunelamento quânticos. Em analogia com tais fenômenos, encontra-se múltipla difusão através da barreira dielétrica quando esta possui largura suficiente para diferenciar múltiplos feixes sobre o plano de incidência, situação na qual não há ressonância.

5.1 Equação da onda elétrica transversal

O presente estudo se restringe a um meio cujas propriedades são contantes nos planos perpendiculares a uma certa direção fixa z (meio estratificado) e possui índice de refração dado por

$$n(z) = \begin{cases} n_1 & , \quad z \leq 0 \\ n_2 & , \quad 0 < z < L \\ n_3 = n_1 & , \quad z \geq L \end{cases} \quad (5.1)$$

com permissividade elétrica e permeabilidade magnética dadas por $\epsilon = \epsilon(z)$ e $\mu = \text{constante}$, respectivamente.

Sejam os campos elétrico e magnético $\mathbf{E} = (E_1, E_2, E_3)$, $\mathbf{B} = (B_1, B_2, B_3)$ com $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ e $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B}$. Em unidades gaussianas, as equações de Maxwell na ausência de cargas e correntes ficam escritas como

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \mathbf{D} &= 0 \\
\nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\
c \nabla \times \mathbf{E} &= -\partial_t \mathbf{B} \\
c \nabla \times \mathbf{H} &= \partial_t \mathbf{D} \quad ,
\end{aligned} \tag{5.2}$$

e, juntamente com a identidade vetorial $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}$, fornecem a equação de onda

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{\epsilon \mu}{c^2} \partial_{tt} \mathbf{E} \quad . \tag{5.3}$$

Para uma onda elétrica transversal monocromática com plano de incidência $y-z$ ($E_2 = E_3 \equiv 0$) e dependência temporal $e^{-i\omega t}$, a equação (5.3) fica escrita como

$$\Delta E_1 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \mu E_1 = 0 \quad .$$

Observando que $\partial_x E_1 = \nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, segue

$$\partial_{yy} E_1(y, z) + \partial_{zz} E_1(y, z) + n^2(z) k^2 E_1(y, z) = 0 \quad , \tag{5.4}$$

onde $k = \omega/c$ e $n = \sqrt{\epsilon \mu}$. A função dada por

$$E_1(y, z) = U(z) e^{in_1 \sin \theta ky} \tag{5.5}$$

com U satisfazendo

$$U''(z) + k^2 [n^2(z) - n_1^2 + n_1^2 \cos \theta] U(z) = 0 \quad , \tag{5.6}$$

é solução da equação (5.4). O ângulo de incidência sobre a interface em $z = 0$ é representado por θ e pode ser tomado entre 0 e $\pi/2$. Evidencia-se a identificação de (5.6) com a equação de Schrödinger independente do tempo, tal que a mudança no índice de refração substitui a presença do potencial. Por sua vez, a solução (5.5) é estacionária e a evolução espacial da onda no sentido do eixo y é análoga à evolução temporal das ondas planas quânticas. A equação (5.6) tem solução dada por

$$\begin{cases} e^{in_1 \cos \theta kz} + R(\tilde{n}, \theta; k, L) e^{-in_1 \cos \theta kz} & , & z \leq 0 \\ A(\tilde{n}, \theta; k, L) e^{in_1 \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} kz} + B(\tilde{n}, \theta; k, L) e^{-in_1 \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} kz} & , & 0 < z < L \\ T(\tilde{n}, \theta; k, L) e^{in_1 \cos \theta kz} & , & z \geq L \end{cases} \tag{5.7}$$

onde $\tilde{n} = n_2/n_1$ e os coeficientes R, A, B, T se obtêm via continuidade da solução e sua derivada em $z = 0$ e $z = L$. De fato, além da similaridade com a equação de Schrödinger, as componentes tangenciais à interface dos campos elétrico e magnético, E_1 e B_2 , são contínuas ($c \nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B} \Rightarrow \partial_z E_1 = i k B_2$). Na região $(0, L)$, U é real quando $\tilde{n}^2 < \sin^2 \theta$

(tunelamento) e oscilatória para $\tilde{n}^2 > \sin^2 \theta$ (difusão). Exclui-se uma componente com fase negativa na região $[L, +\infty)$ ao se tomar apenas feixes incidentes a partir da esquerda.

5.2 Coeficientes de transmissão e reflexão

Considerando a difusão, pode-se procurar múltiplos coeficientes através de sucessivas reflexões e transmissões (como feito para a barreira de potencial, capítulo 3). É fisicamente natural investigar tal comportamento, uma vez que há duas interfaces que condicionam a propagação do feixe.

A incidência sobre $z = 0$ a partir da região $(-\infty, 0]$ e as condições de continuidade fornecem

$$\begin{cases} 1 + r_0(\tilde{n}, \theta) = t_0(\tilde{n}, \theta) \\ \cos \theta [1 - r_0(\tilde{n}, \theta)] = \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} t_0(\tilde{n}, \theta) \end{cases} ,$$

de onde segue

$$\begin{aligned} r_0(\tilde{n}, \theta) &= \frac{\cos \theta - \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta}}{\cos \theta + \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta}} , \\ t_0(\tilde{n}, \theta) &= \frac{2 \cos \theta}{\cos \theta + \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta}} . \end{aligned} \tag{5.8}$$

Para uma onda incidindo sobre $z = 0$ a partir da região $(0, L)$, sentido negativo do eixo z , tem-se

$$\begin{cases} 1 + \tilde{r}_0(\tilde{n}, \theta) = \tilde{t}_0(\tilde{n}, \theta) \\ \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} [1 - \tilde{r}_0(\tilde{n}, \theta)] = \cos \theta \tilde{t}_0(\tilde{n}, \theta) \end{cases} ,$$

portanto,

$$\begin{aligned} \tilde{r}_0(\tilde{n}, \theta) &= -r_0(\tilde{n}, \theta) , \\ \tilde{t}_0(\tilde{n}, \theta) &= \frac{\sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta}}{\cos \theta} t_0(\tilde{n}, \theta) . \end{aligned} \tag{5.9}$$

Analogamente, para incidência sobre $z = L$ obtém-se

$$\begin{aligned}\tilde{r}_L(\tilde{n}, \theta; k, L) &= \tilde{r}_0(\tilde{n}, \theta) e^{2in_1k \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} L} , \\ \tilde{t}_L(\tilde{n}, \theta; k, L) &= \tilde{t}_0(\tilde{n}, \theta) e^{in_1k (\sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} - \cos \theta) L} .\end{aligned}\quad (5.10)$$

A fim de calcular os coeficientes de reflexão e transmissão R , T , devem ser consideradas as sucessivas contribuições devidas ao encontro de E_1 com cada fronteira entre índices de refração diferentes. A primeira contribuição para R vem da reflexão em $z = 0$ (r_0) do feixe incidente vindo de $-\infty$, cuja parcela transmitida na região $(0, L)$, t_0 , provoca reflexão em $z = L$ ($t_0 r_L$) com propagação sobre $z = 0$ e componente transmitida em $(-\infty, 0]$, $t_0 r_L \tilde{t}_0$, que é a segunda contribuição para R . Quando há n reflexões em $z = 0$ na região $(0, L)$, os coeficientes ficam multiplicados por $(r_L \tilde{r}_0)^n$. Assim,

$$R := \sum_n R_n = r_0 + t_0 r_L \tilde{t}_0 \sum_{n=0}^{\infty} (r_L \tilde{r}_0)^n = r_0 + \frac{t_0 r_L \tilde{r}_0}{1 - r_L \tilde{r}_0} , \quad (5.11)$$

analogamente,

$$T := \sum_n T_n = t_0 t_L \sum_{n=0}^{\infty} (r_L \tilde{r}_0)^n = \frac{t_0 t_L}{1 - r_L \tilde{r}_0} , \quad (5.12)$$

onde $|r_L \tilde{r}_0| = |r_0|^2 < 1$ e $R = R(\tilde{n}, \theta; k, L)$, $T = T(\tilde{n}, \theta; k, L)$.

A partir das equações (5.8) e (5.9), é fácil ver que $r_0 + t_0 \tilde{t}_0 = 1$. Além disso, $\tilde{r}_0 = -r_0$ implica

$$\begin{aligned}|R|^2 &= \frac{|r_0 + r_L|^2}{|1 + r_0 r_L|^2} , \\ |T|^2 &= \frac{|t_0 t_L|^2}{|1 + r_0 r_L|^2} ,\end{aligned}\quad (5.13)$$

de onde segue

$$|R|^2 + |T|^2 = 1 . \quad (5.14)$$

Ocorre ressonância, $|T|^2 = 1$, quando

$$r_L(\tilde{n}, \theta; k, L) = -r_0(\tilde{n}, \theta) \Leftrightarrow n_1 k \sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} L = n\pi ; \quad n = 0, 1, 2, \dots ,$$

pois $|1 - r_0^2|^2 = (t_0 \tilde{t}_0)^2 = |t_0 t_L|^2$.

Por outro lado, considerando as equações (5.8), (5.9), (5.10) e tomando o módulo de cada n -ésimo termo individualmente encontra-se

$$\sum_n |R_n|^2 = r_0^2 + \frac{(t_0 r_0 \tilde{t}_0)^2}{1 - r_0^4} \neq |R|^2, \quad (5.15)$$

$$\sum_n |T_n|^2 = \frac{(t_0 \tilde{t}_0)^2}{1 - r_0^4} \neq |T|^2,$$

onde assume-se ausência de interferência entre as amplitudes. Observando que $(t_0 \tilde{t}_0)^2 = (1 - r_0)^2$ se obtém

$$\sum_n |R_n|^2 + \sum_n |T_n|^2 = 1. \quad (5.16)$$

As grandezas reais $|T|^2$, $|R|^2$, $|T_n|^2$ e $|R_n|^2$ representam intensidades de energia relativas àquela total incidente. Quando os feixes são localizados espacialmente no plano $y - z$ (seção seguinte), a diferença entre os significados dos coeficientes (5.13) e (5.15) é análoga à difusão quântica: Para L grande o suficiente para distinguir espacialmente as múltiplas reflexões e transmissões é válido calcular os somatórios de $|R_n|^2$ e $|T_n|^2$ (limite de “partículas”), enquanto L ’s pequenos não fornecem distâncias entre picos suficientes para destacá-los entre si (quando valem $|R|^2$ e $|T|^2$, limite “ondular”). A figura 10-b ilustra múltiplos feixes: tanto distantes estão as interfaces, quanto apartam-se as linhas em $z < 0$ e $z > L$.

5.3 Localização de feixes

Podem ser formados feixes localizados no plano de incidência $y - z$ através da superposição das ondas planas E_1 (equação (5.5)) via uma distribuição gaussiana $g = g(\theta; \theta_0, \delta)$ sobre o ângulo de incidência θ :

$$g(\theta; \theta_0, \delta) = \frac{\sqrt{\delta}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-(\cos \theta - \cos \theta_0)^2 \delta^2 / 4},$$

onde $\delta = n_1 k d$ é uma grandeza adimensional que estima a largura da distribuição. Sem perda de generalidade, $g(\theta; \theta_0, \delta)$ pode ter um pico agudo em θ_0 de maneira que não ocorram difusão e tunelamento simultaneamente. As distribuições espacialmente localizadas para incidência, reflexão e transmissão ficam dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned}
E_{1,inc}(y, z; \theta_0, \delta) &= \int_0^{\pi/2} g(\theta; \theta_0, \delta) e^{i\delta \cos \theta z_d} e^{i\delta \sqrt{1-\cos^2 \theta} y_d} d\theta, \\
E_{1,ref}(y, z; n_2, \theta_0, \delta) &= \int_0^{\pi/2} R(\theta; \tilde{n}, \delta, L_d) g(\theta; \theta_0, \delta) e^{-i\delta \cos \theta z_d} e^{i\delta \sqrt{1-\cos^2 \theta} y_d} d\theta, \\
E_{1,tra}(y, z; n_2, \theta_0, \delta) &= \int_0^{\pi/2} T(\theta; \tilde{n}, \delta, L_d) g(\theta; \theta_0, \delta) e^{i\delta \cos \theta z_d} e^{i\delta \sqrt{1-\cos^2 \theta} y_d} d\theta,
\end{aligned} \tag{5.17}$$

onde $y_d = y/d$, $z_d = z/d$ e $L = L/d$. Quando os módulos das expressões acima são estreitos em relação a L , pode-se observar claramente a múltipla difusão, como ilustrado nas figuras 10-b, 11 e 12. Neste caso em particular, a distribuição angular está centrada em $\theta_0 = \pi/4$ com $\tilde{n} = \sqrt{3}/2$ e a condição $\tilde{n} > \sin \theta$ fornece um ângulo crítico $\pi/3$ a partir do qual haveria tunelamento. No entanto, a escolha de $\delta = 50$ garante que $g(\theta > \pi/3) \sim 0$. Por outro lado, na figura 10-a a escolha de $\delta = 50$ garante que $g(\theta < \pi/6)$ é desprezível, havendo somente tunelamento (cuja intensidade é relevante apenas para barreiras finas).

Múltiplas difusões validam o cálculo das probabilidades dadas pelas expressões (5.15). É natural observar na figura 10-b, por exemplo, que os feixes refletidos (e transmitidos) ficam mais distantes uns dos outros à medida que L cresce e a largura dos múltiplos pacotes sobrepostos é menor. Assim como no caso da difusão quântica, as funções graficadas nas figuras 11 e 12 coincidem com aquelas obtidas quando os coeficientes R e T das integrais (5.17) são substituídos por R_n , T_n , $n = 1, 2, \dots$. Além disso, é relevante observar

$$\sum_{n=0}^{\infty} |T_n|^2 = \frac{(t_0 \tilde{t}_0)^2}{1 - r_0^4} = \frac{(1 - r_0^2)^2}{1 - r_0^4} < 1$$

ou seja, no limite de partículas (ausência de interferência) não há ressonância.

O tunelamento sempre apresenta componentes refletida e transmitida únicas. De fato, observando que para obtenção dos respectivos coeficientes basta efetuar $i\sqrt{\tilde{n}^2 - \sin^2 \theta} \leftrightarrow \sqrt{\sin^2 \theta - \tilde{n}^2}$, é fácil ver que a série $\sum_n |T_n|^2$ diverge.

Os resultados expostos neste capítulo indicam importante relação entre as fenomenologias quântica (interação de partículas com barreiras de potencial) e ótica (transmissão de feixes através de barreira dielétrica). Dada a evidente dificuldade empírica dos problemas estudados nos capítulos 2, 3 e 4, a analogia ótica abre perspectivas experimentais a respeito de problemáticas como o tempo de tunelamento, efeito Hartman e consequências da existência dos limites “onda-partícula”. Destaca-se o fato da solução (5.5) ser estacionária,

evitando dificuldades de cunho prático que dizem respeito à mensurabilidade do tempo.

APÊNDICES

A.1 Método da Fase Estacionária (MFE)

Seja

$$\Psi(x, t; k_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k; k_0) \Phi(x, t, k) dk, \quad (5.18)$$

com

$$g(k; k_0) = e^{-d^2(k-k_0)^2/4}; \quad \Delta k := 1/d, \quad (5.19)$$

e $\Phi(x, t, k) = |\Phi(x, t, k)| e^{i(\pm kx - k^2 t + \alpha(k))}$ é quadrado-integrável. Para Δk pequeno o suficiente de modo que a fase $\xi(x, t, k) = \pm kx - k^2 t + \alpha(k)$ varie pouco no intervalo $[k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2]$ e possa ser aproximada por

$$\xi(x, t, k) \simeq \xi(x, t, k_0) + (k - k_0) \left[\frac{\partial \xi(x, t, k)}{\partial k} \right]_{k=k_0},$$

para t fixo, de tal maneira que a equação (5.18) possa ser reescrita como

$$\Psi(x, t; k_0) \simeq e^{i\xi(x, t, k_0)} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) |\varphi(x, k)| e^{i(k-k_0)[\partial_k \xi(x, t, k)]_{k=k_0}} dk.$$

Quando $[\partial_k \xi(x, t, k)]_{k=k_0} > 1/\Delta k$ o integrando acima oscila muitas vezes dentro do intervalo para o qual $g(k)|\varphi(x, k)| > 0$, de modo que tais oscilações se cancelam mutuamente sob integração. Por outro lado, quando $g(k)|\varphi(x, k)|$ possui pico na vizinhança de k_0 o máximo de $|\Psi(x, t)|$ é aquele ponto (x, t) para o qual as oscilações sobre a variável k são eliminadas, ou seja, para $[\partial_k \xi(x, t, k)]_{k=k_0} = 0$. Tal ferramenta de localização do máximo de função obtida é chamada Método da Fase Estacionária (MFE) [46], cujo nome provém do anulamento da derivada da fase em algum ponto k_0 .

No caso do pacote de onda incidente (2.14), por exemplo, o máximo de $|\Psi_{inc}(x, t; k_0)|$ fica dado por

$$\left. \frac{\partial}{\partial k} [kx - k^2 t] \right|_{k=k_0} = 0 \Rightarrow x_{inc}^M(t) = 2k_0 t \quad .$$

Por sua vez, o pico transmitido pela barreira de potencial (2.7) tem posição satisfeita por

$$\left. \frac{\partial}{\partial k} [kx - k^2 t - kL + \alpha(k; L)] \right|_{k=k_0} = 0 \Rightarrow x_{tra}^M(t, L) = L + 2k_0 t - \left. \frac{\partial \alpha(k; L)}{\partial k} \right|_{k=k_0} \quad .$$

A.2 Coeficientes de N barreiras

Podem ser obtidos os coeficientes das funções de onda incidente, transmitida e refletida em um caso geral de N barreiras de potencial V_0 com distância de separação d e $k_0 < V_0$.

Prova-se que no caso de N barreiras é válida a seguinte expressão

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = \prod_{s=1}^N \widetilde{M}_s \begin{pmatrix} A_N \\ A'_N \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

onde $\widetilde{M}_s = W^{-1}[ik, (s-1)(L+d)] W[\rho, (s-1)(L+d)] W^{-1}[\rho, sL+(s-1)d] W[ik, sL+(s-1)d]$, segundo a matriz W definida no capítulo 4. Considerando as condições de continuidade na s -ésima barreira, ou seja, em $x = (s-1)(L+d)$ e $x = s(L+d) - d = sL + (s-1)d$, tem-se a expressão

$$\begin{aligned} W[ik, (s-1)(L+d)] \begin{pmatrix} A_{s-1} \\ A'_{s-1} \end{pmatrix} &= W[\rho, (s-1)(L+d)] \begin{pmatrix} B_s \\ B'_s \end{pmatrix} , \\ W[\rho, sL+(s-1)d] \begin{pmatrix} B_s \\ B'_s \end{pmatrix} &= W[ik, sL+(s-1)d] \begin{pmatrix} A_s \\ A'_s \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (5.21)$$

A equação (5.20) é válida para $N=1$. De fato, neste caso $s=1$,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] W^{-1}[\rho, L] W[ik, L] \begin{pmatrix} A_1 \\ A'_1 \end{pmatrix}$$

que reproduz exatamente a equação para o tunelamento de uma barreira, onde $A_0 = 1$, $A'_0 = R$, $A_N = T$ e $A'_N = 0$. Supondo que a expressão (5.20) é válida para $N_0 - 1$. Então,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = \prod_{s=1}^{N_0-1} \widetilde{M}_s \begin{pmatrix} A_{N_0-1} \\ A'_{N_0-1} \end{pmatrix} .$$

Tomando $s = N_0$ na equação (5.21) obtém-se

$$\begin{aligned} W[ik, (N_0-1)(L+d)] \begin{pmatrix} A_{N_0-1} \\ A'_{N_0-1} \end{pmatrix} &= W[\rho, (N_0-1)(L+d)] \begin{pmatrix} B_{N_0} \\ B'_{N_0} \end{pmatrix} , \\ W[\rho, N_0L+(N_0-1)d] \begin{pmatrix} B_{N_0} \\ B'_{N_0} \end{pmatrix} &= W[ik, N_0L+(N_0-1)d] \begin{pmatrix} A_{N_0} \\ A'_{N_0} \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

onde, pela hipótese de indução,

$$\begin{pmatrix} A_{N_0-1} \\ A'_{N_0-1} \end{pmatrix} = \left[\prod_{s=1}^{N_0-1} \tilde{M}_s \right]^{-1} \begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} .$$

Segue que

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = \left[\prod_{s=1}^{N_0-1} \tilde{M}_s \right] W^{-1}[ik, (N_0-1)(L+d)] W[\rho, (N_0-1)(L+d)] \\ \cdot W^{-1}[\rho, N_0L + (N_0-1)d] W[ik, N_0L + (N_0-1)d] \begin{pmatrix} A_{N_0} \\ A'_{N_0} \end{pmatrix} ,$$

isto é,

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = \prod_{s=1}^{N_0} \tilde{M}_s \begin{pmatrix} A_{N_0} \\ A'_{N_0} \end{pmatrix} . \quad (5.22)$$

Logo, a expressão (5.20) é válida para todo $N \in \mathbb{N}$. ■

Além disso, a equação (5.20) pode ser reescrita de maneira mais simples:

$$\tilde{M}_s = \Delta[-ik(s-1)(L+d)] W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] \Delta[\rho(s-1)(L+d)] \Delta[-\rho(sL + (s-1)d)] \\ \cdot W[\rho, 0] W[ik, 0] \Delta[ik(sL + (s-1)d)] \\ = \Delta[-ik(s-1)(L+d)] W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] \Delta[-\rho L] W[\rho, 0] W[ik, 0] \Delta[ik(sL + (s-1)d)] ,$$

pois $\Delta[\rho\alpha]\Delta[-\rho\beta] = \Delta[\rho(\alpha - \beta)]$, e

$$\tilde{M}_{s-1} \tilde{M}_s = \Delta[-ik(s-2)(L+d)] W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] \Delta[-\rho L] W[\rho, 0] W[ik, 0] \Delta[ik((s-1)L + (s-2)d)] \\ \cdot \Delta[-ik(s-1)(L+d)] W^{-1}[ik, 0] W[\rho, 0] \Delta[-\rho L] W[\rho, 0] W[ik, 0] \Delta[ik(sL + (s-1)d)] ,$$

$$\tilde{M}_{s-1} \tilde{M}_s = \Delta[-ik(s-2)(L+d)] \Delta[ikd] M^2 \Delta[ik(sL + (s-1)d)] ,$$

onde $M = M[k, \rho; L, d]$ é dada pela equação (4.4). Quando $s = 1$ o primeiro termo de \tilde{M}_s é $\Delta[0] = \mathbf{I}$. Assim,

$$\prod_{s=1}^N \tilde{M}_s = \Delta[ikd] M^N \Delta[ik(NL + (N-1)d)]$$

ou seja, a equação (5.20) fica escrita como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A'_0 \end{pmatrix} = \Delta[ikd] M^N \Delta[ik(NL + (N-1)d)] \begin{pmatrix} A_N \\ A'_N \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

para todo $N \in \mathbb{N}$. Quando $N = 1, 2$ recupera-se as expressões de uma e duas barreiras de potencial.

A.3 Gráficos

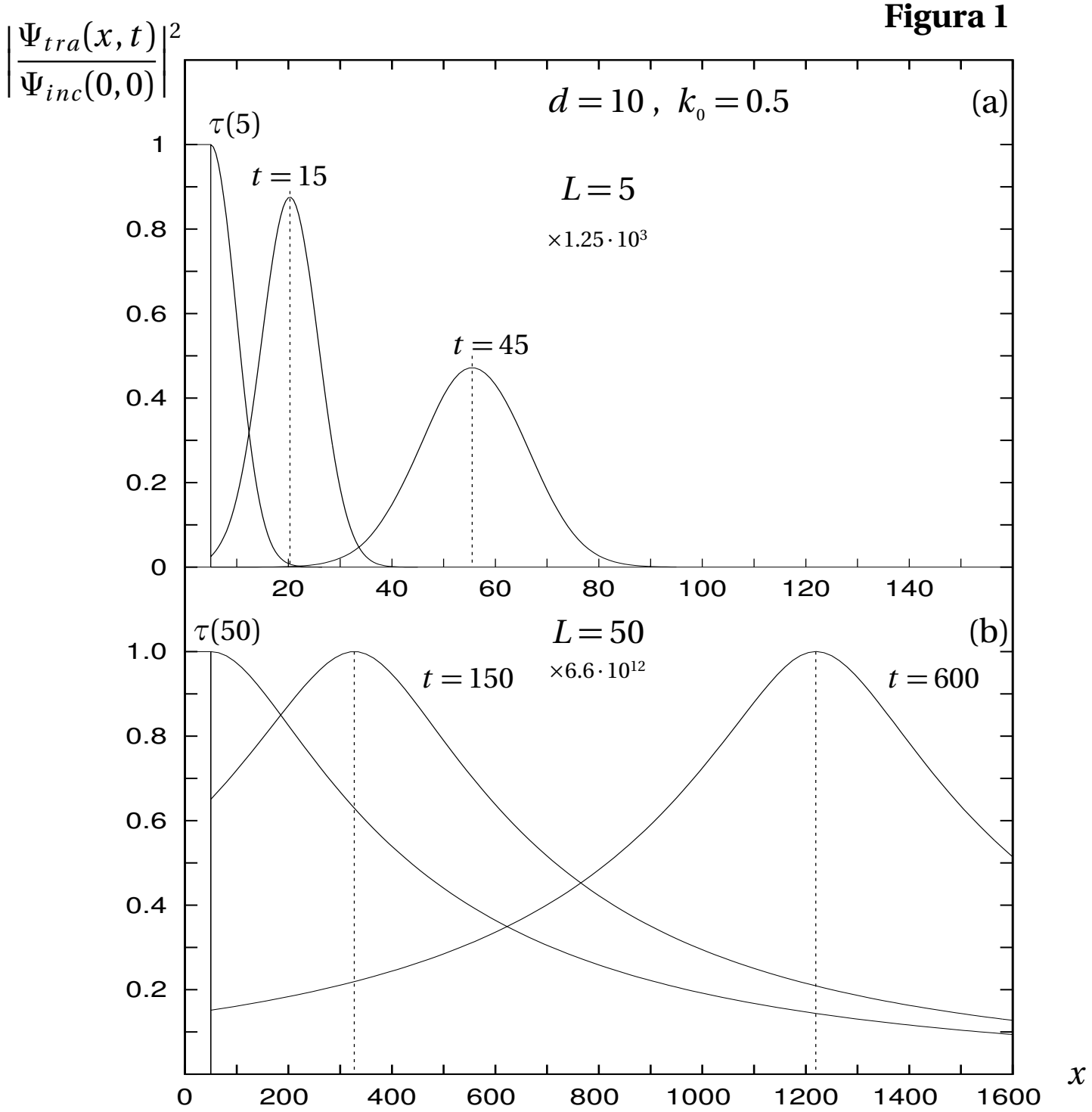


Figura 1: Pacotes de onda transmitidos através de barreiras de potencial ($V_0 = 1$). A velocidade de propagação dos máximos (acompanhados pelas linhas pontilhadas) confirmam o valor de \hat{k} , equação (2.17).

$$g(k; k_0, d)|T(k; L)|$$

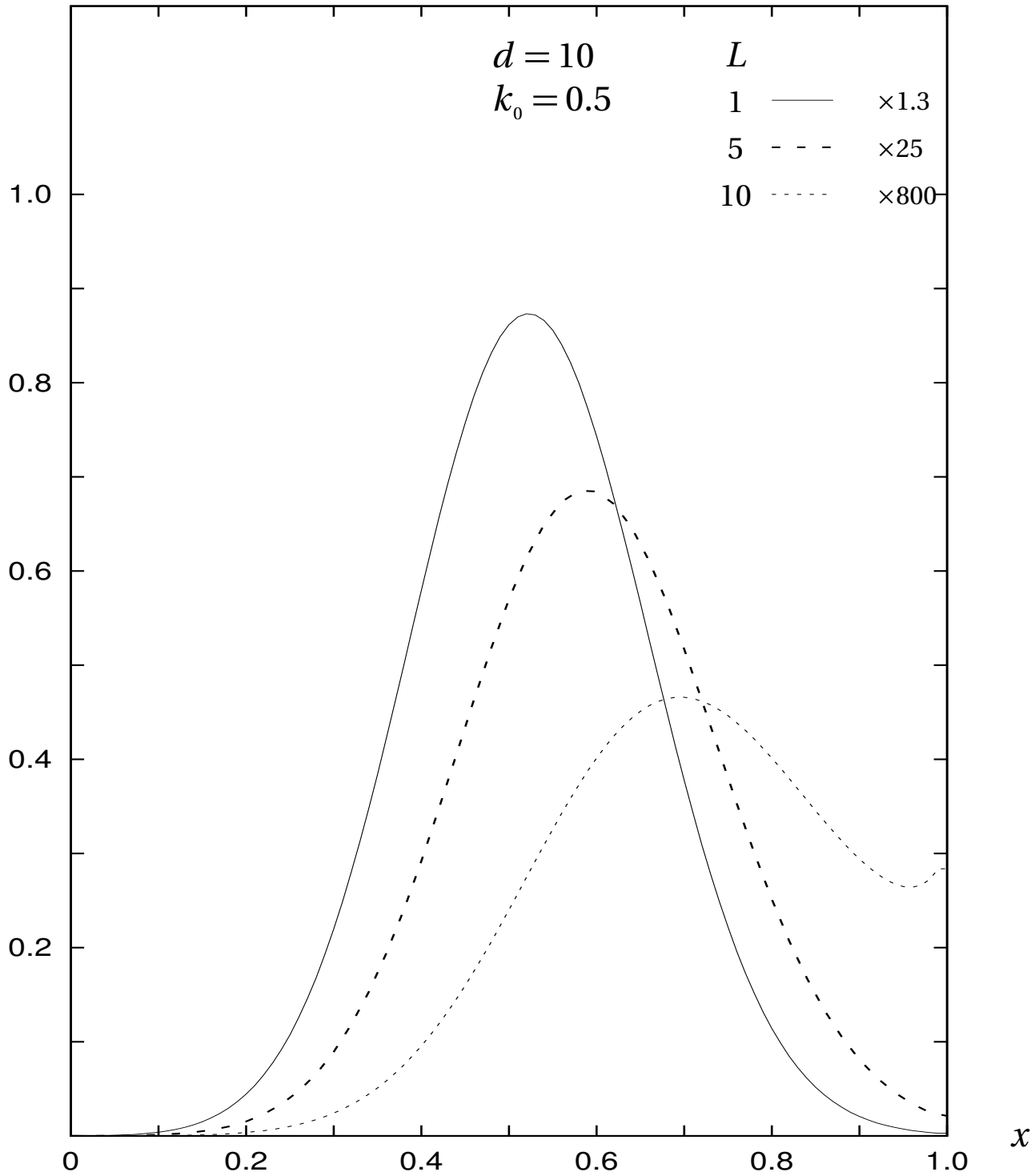
Figura 2

Figura 2: Comportamento da distribuição sobre o momento para pacotes de onda transmitidos através de barreiras de potencial de diferentes larguras. A deformação em relação à distribuição incidente (gaussiana) é de particular importância para $L > \Delta x_{inc}$

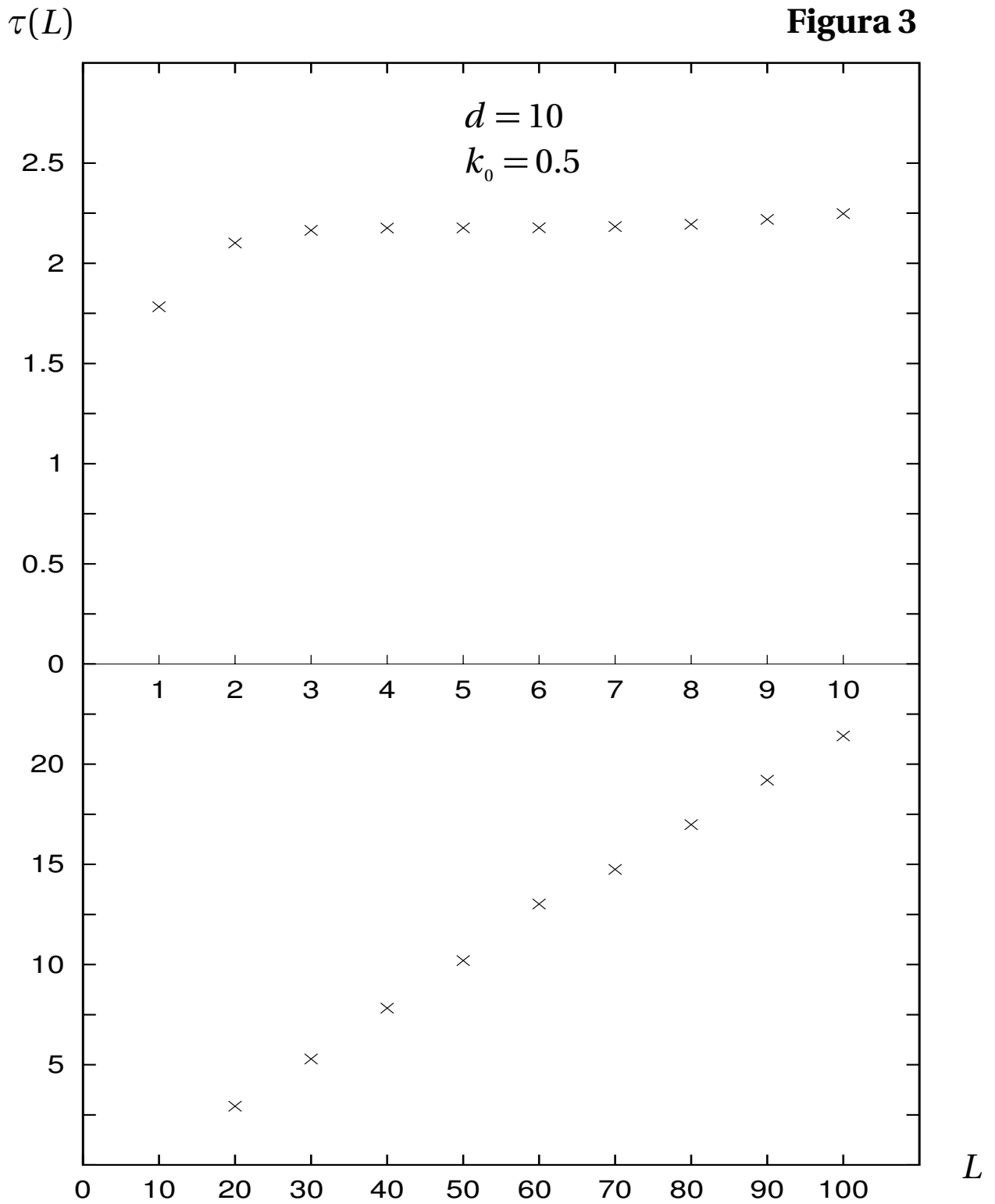


Figura 3: Intervalo de tempo τ entre a incidência sobre a barreira e o surgimento do pico transmitido na fronteira oposta da mesma (tempo de transmissão). Destaca-se o comportamento linear a partir de L 's suficientemente grandes.

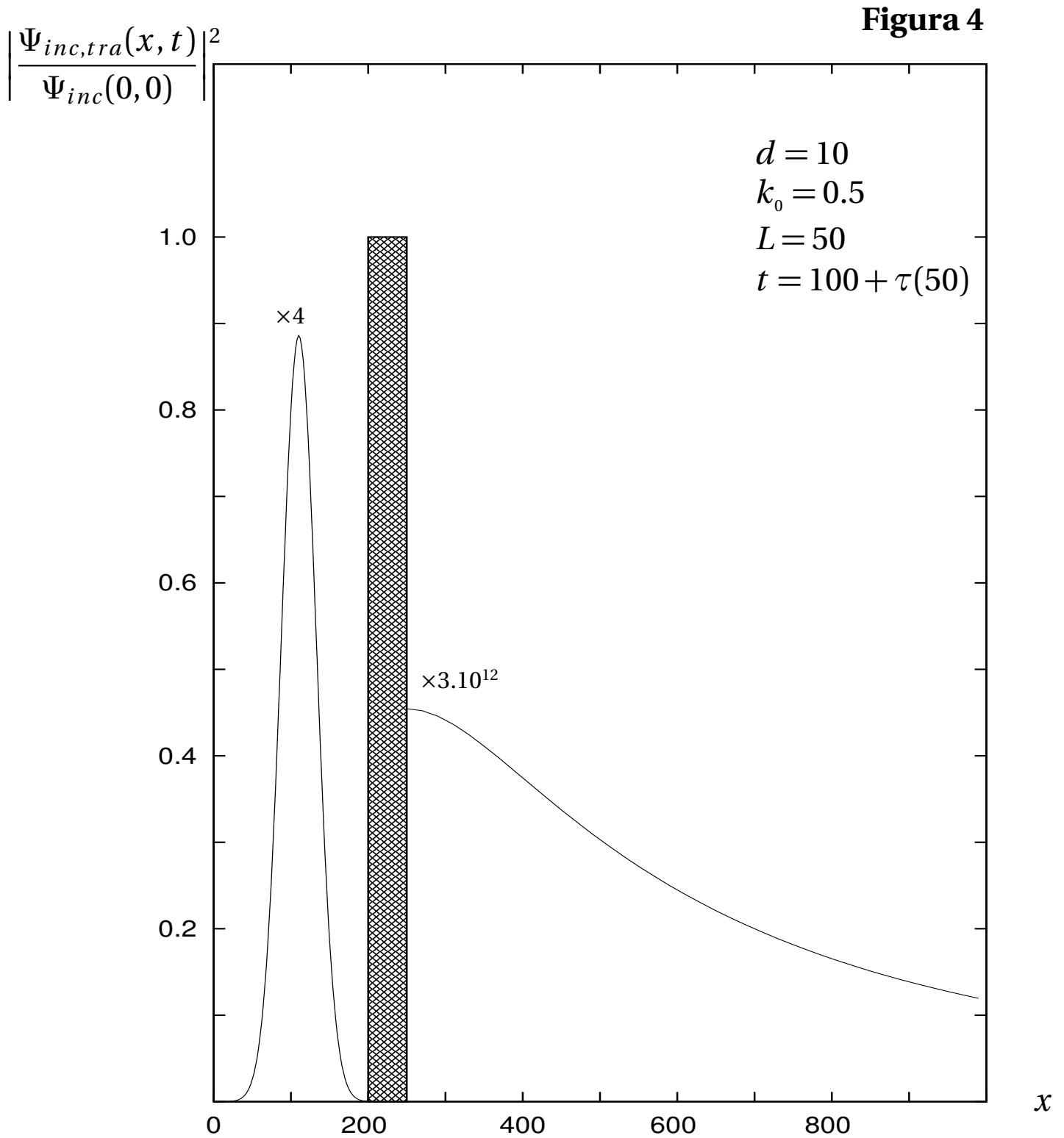


Figura 4: Paradoxo de Hartman. Observa-se surgimento do pico transmitido anterior ao encontro entre o máximo incidente e a barreira.

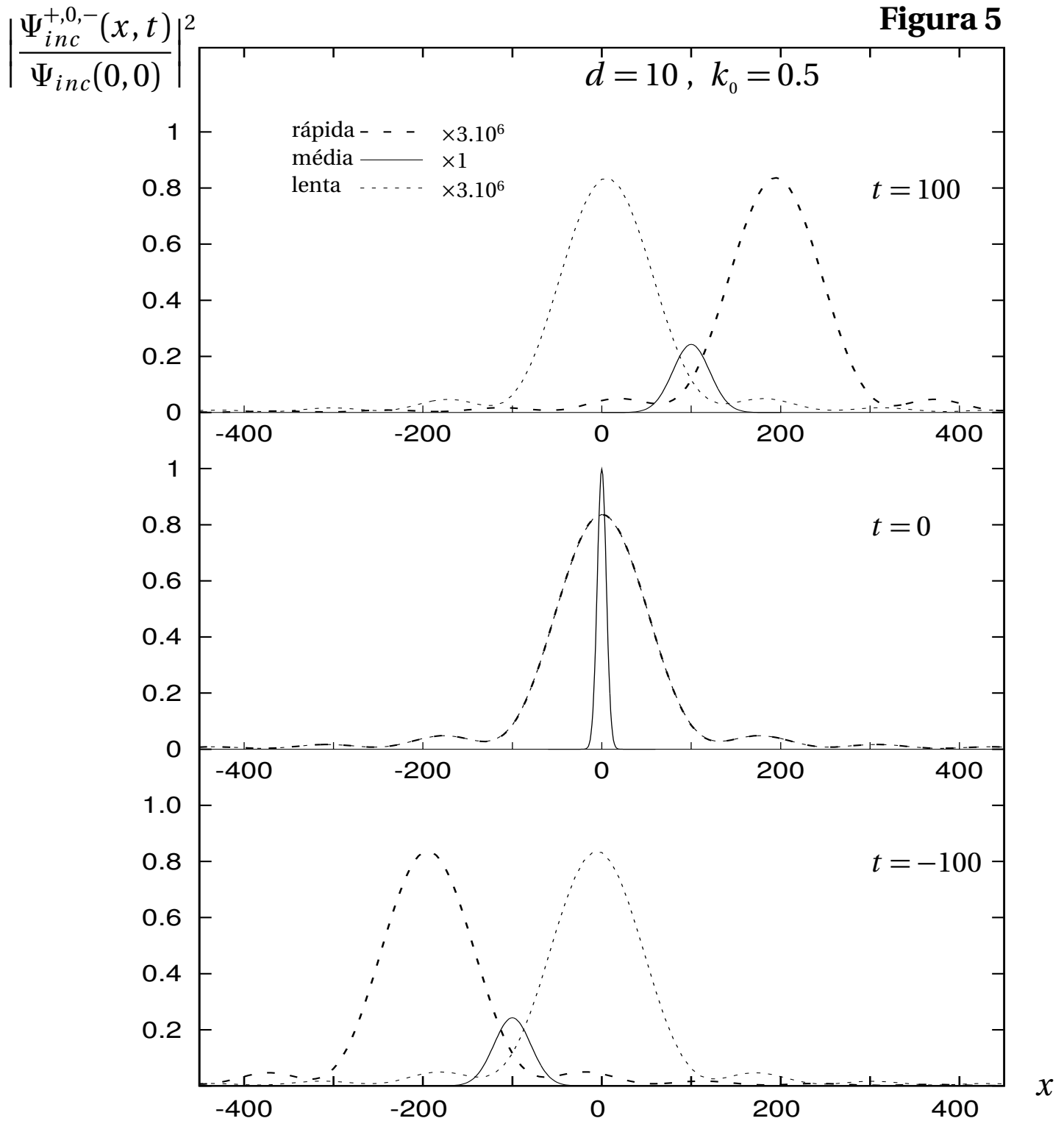


Figura 5: Decomposição do pacote incidente em componentes de diferentes velocidades. Neste caso, $\epsilon = 0.05$. A comparação com a figura 4 mostra como a componente mais veloz encontra a barreira enquanto o pico do pacote de onda total está em $x = 100$.

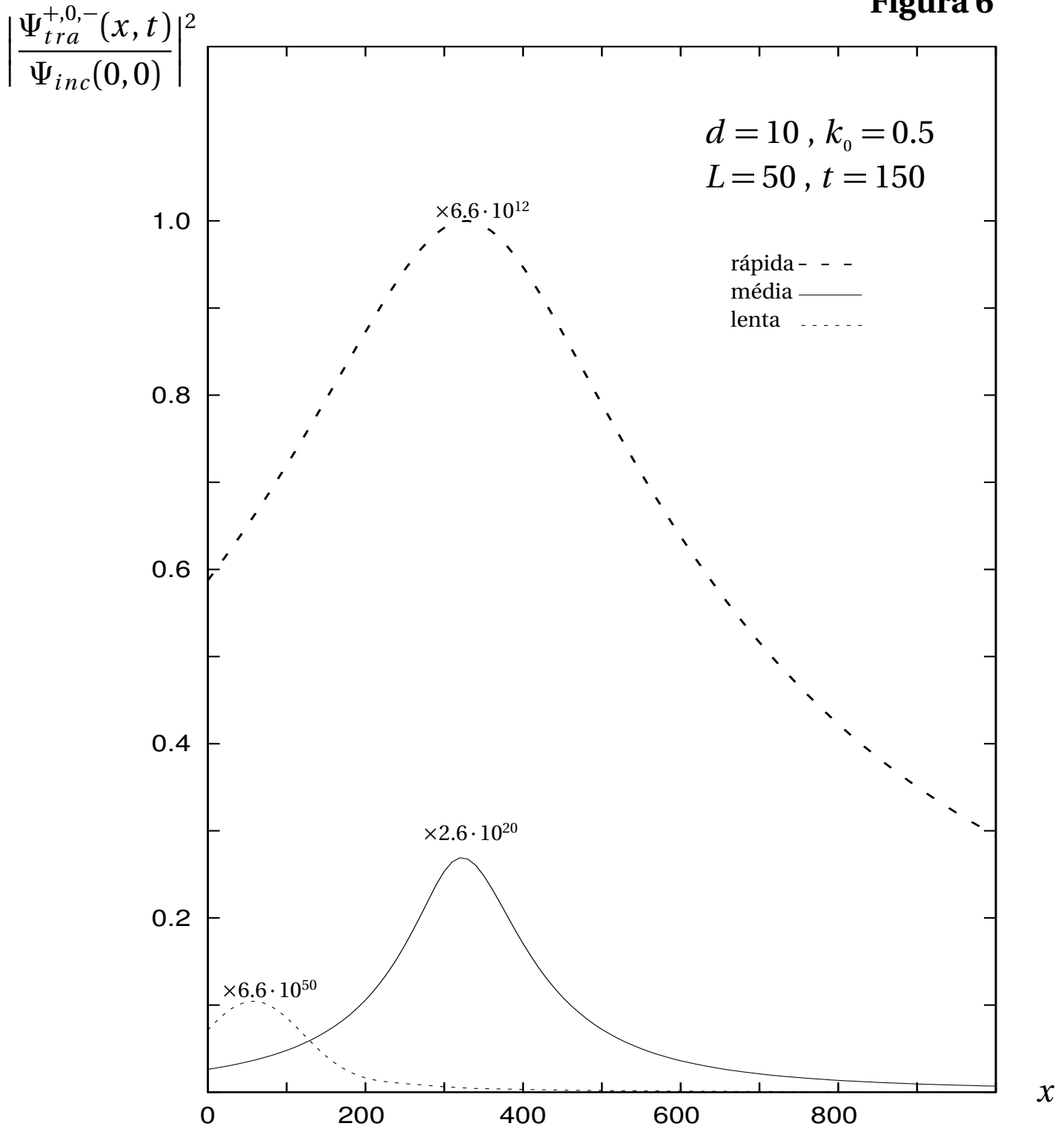
Figura 6

Figura 6: Comparação entre a relevância das contribuições associadas às componentes lenta(−), média(0) e veloz(+) incidentes, com $\epsilon = 0.05$. Para L suficientemente grande, a transmissão fica praticamente descrita somente por Ψ_{tra}^{+} .

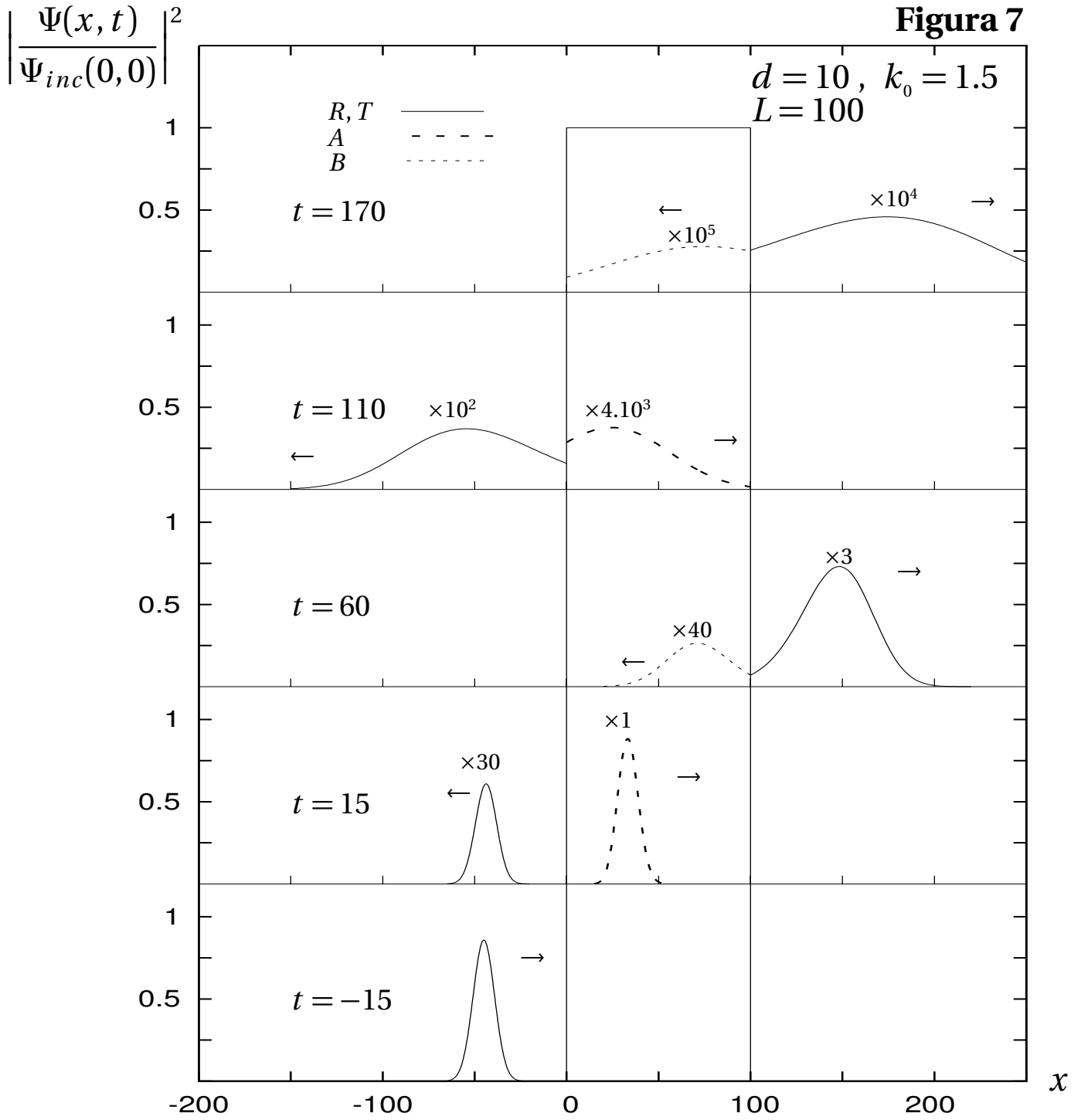


Figura 7: Múltipla difusão sobre a barreira de potencial unidimensional de altura 1. Pode-se verificar numericamente a concordância com o MFE.

Probabilidade de transmissão

Figura 8

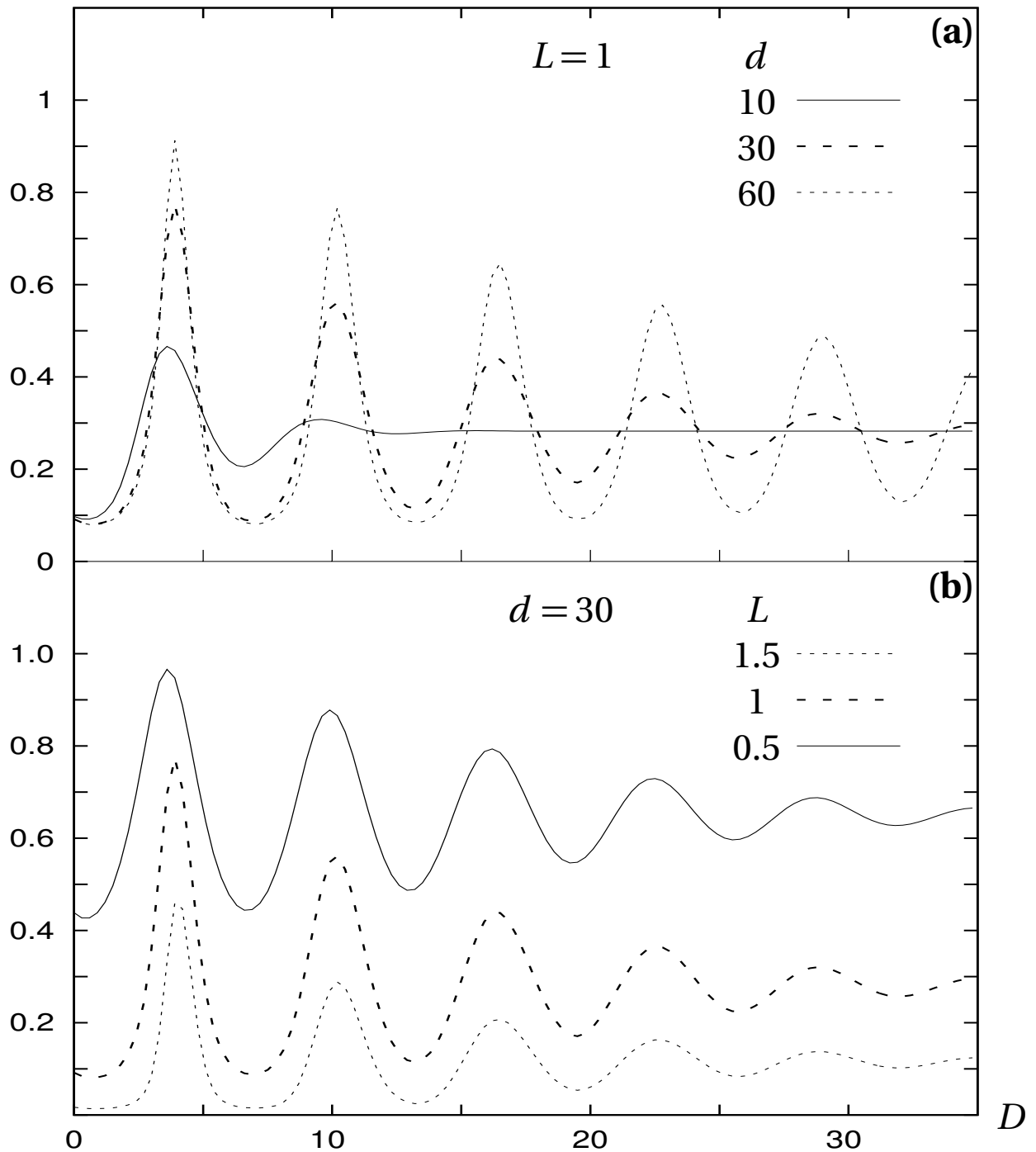


Figura 8: Transição entre unicidade e multiplicidade de picos transmitidos ($k_0 = 0.5$) em função da distância de separação D entre barreiras idênticas. O valor constante para o qual tendem as funções em (a) é exatamente $P_{T,\text{partícula}}(k_0, L)$, conforme esperado.

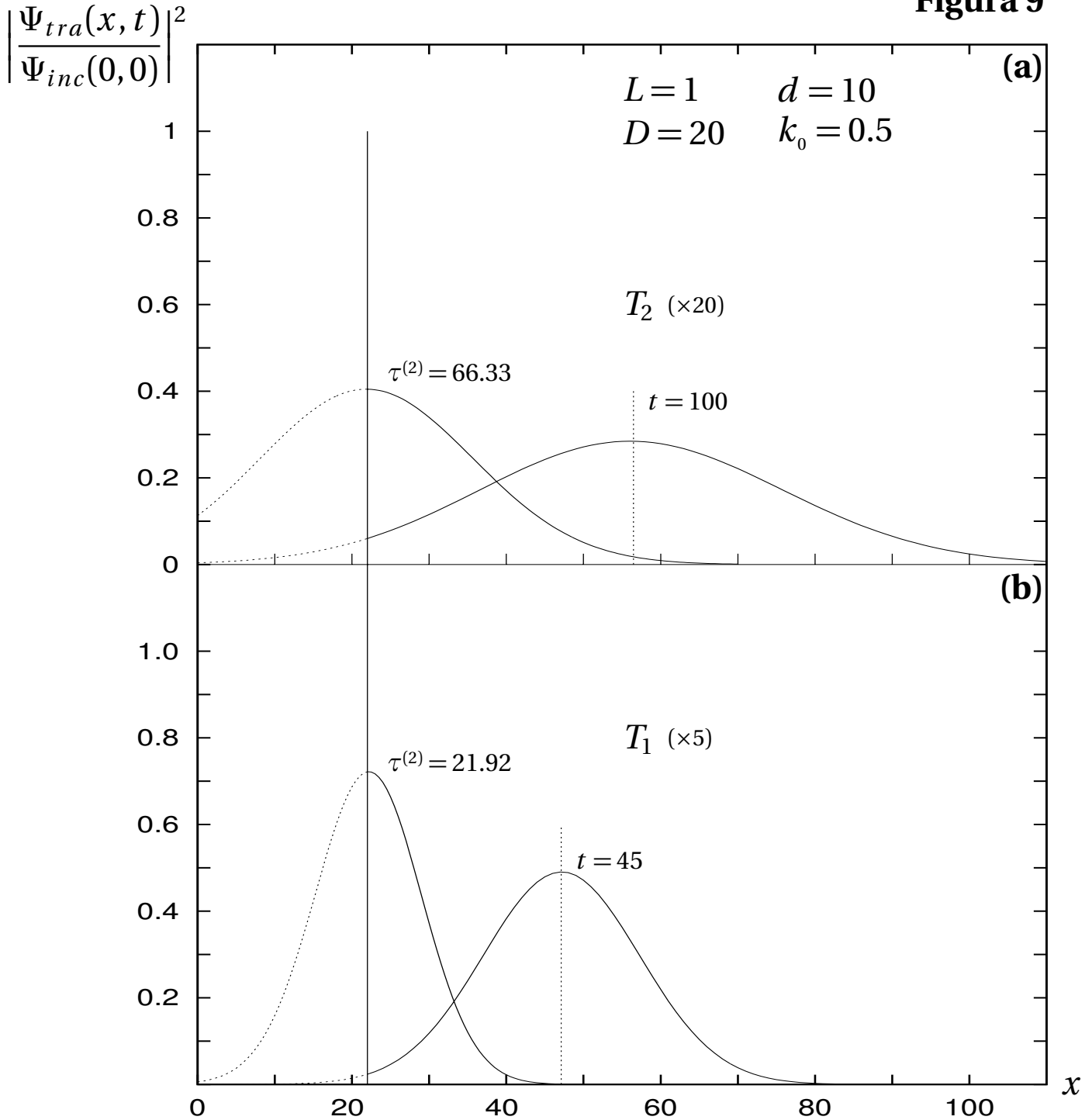
Figura 9

Figura 9: Primeiros pacotes transmitidos através de duas barreiras de potencial idênticas ($V_0 = 1$). As linhas pontilhadas indicam as previsões do MFE, que concordam satisfatoriamente, confirmando a dependência do tempo de transmissão ($\tau^{(2)}$) em relação a D , conforme previsto via consideração das fases dos múltiplos coeficientes.

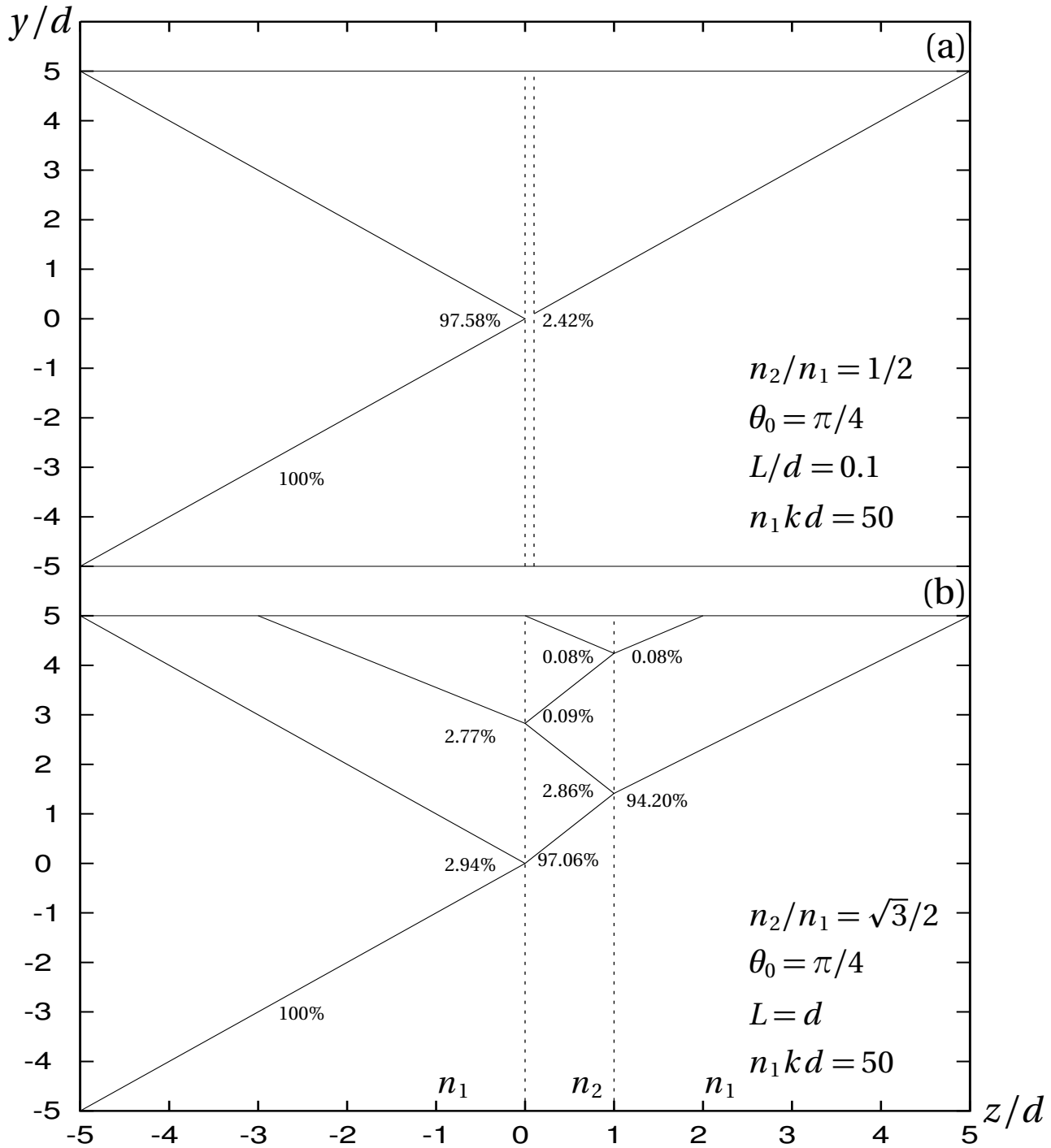
Figura 10

Figura 10: Ilustração da propagação de feixes localizados através de uma barreira dielétrica. Evidencia-se em (b) a analogia à múltipla difusão quântica.

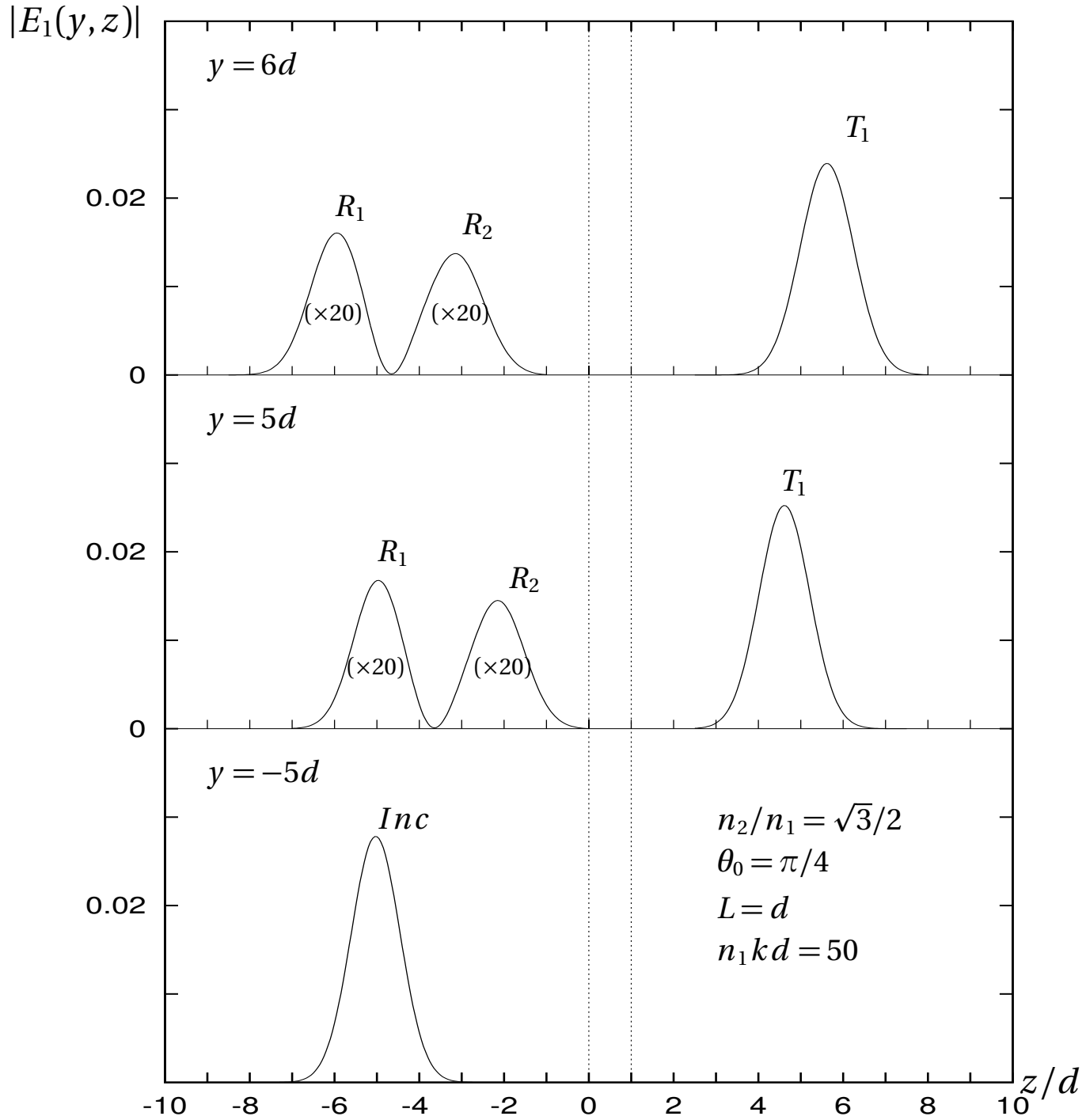
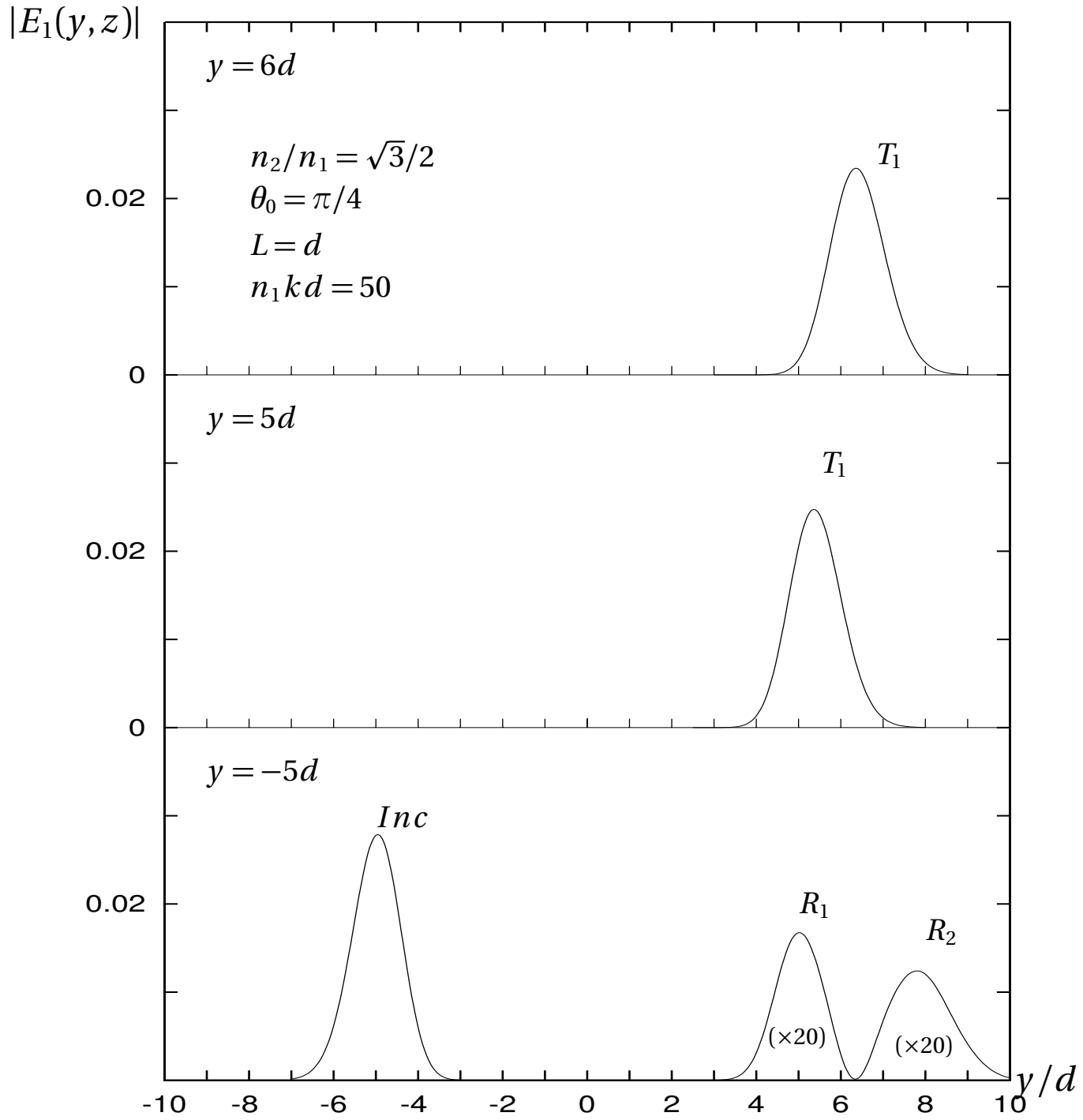
Figura 11

Figura 11: Propagação dos múltiplos feixes localizados ao longo da componente z do plano de incidência. Eles coincidem perfeitamente com aqueles obtidos via integração em R_1, R_2, T_1 , etc.

Figura 12**Figura 12:** Propagação dos múltiplos feixes localizados ao longo da componente y do plano de incidência.

Bibliografia

- [1] E. U. Condon, “Quantum ,mechanics of collision processes”, Rev. Mod. Phys. **3**, 43 (1931).
- [2] L. A. MacColl, “Note on the transmission and reflection of wave packets by potential barriers”, Phys. Rev. **40**, 621-626 (1932).
- [3] T. E. Hartman, “Tunneling of a wave packet”, J. Appl. Phys. **33**, 3427-3433 (1962).
- [4] J. R. Fletcher, “Time delay in tunneling through a potential barrier”, J. Phys. C **18**, L55-L59 (1985).
- [5] E. H. Hauge, J. P. Falck, T. A. Fjeldly, “Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers”, Phys. Rev. B **36**, 4203-4214 (1987).
- [6] V. S. Olkhovsky, E. Recami, A. K. Zaichenko, “Tunneling time problem - more about the analysis of tunneling processes - response”, Solid State Commun. **89**, 31 (1994).
- [7] V. S. Olkhovsky, E. Recami, F. Raciti, A. K. Zaichenko, “More about tunneling times, the dwell time and the Hartman effect”, J. de Physique-I (France) **5**, 1351 (1995).
- [8] V. S. Olkhovsky, E. Recami, J. Jakiel, “Unified time analysis of photon and particle tunneling”, Phys. Rep. **398**, 133-178 (2004).
- [9] K. Imafuku, I. Ohba, Y. Yamanaka, “ Effects of inelastic scattering on tunneling time based on the generalized diffusion process approach”, Phys. Rev. A **56**, 1142 (1997).
- [10] D. Sokolovski, L. M. Baskin, “Transversal time in quantum scattering”, Phys. Rev. A **36**, 4604-4611 (1987).
- [11] S. Brouard, R. Sala, J. G. Muga, “ Systematic-approach to define and classify quantum transmission and reflection times”, Phys. Rev. A **49**, 4312 (1994).
- [12] M. Büttiker, “Larmor precession and the transversal time for tunneling”, Phys. Rev. B **27**, 6178-6188 (1983).
- [13] M. Büttiher, R. Landauer, “Transversal time for tunneling”, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739-1742 (1982).

- [14] M. Büttiker, "Larmor precession and the transversal time for tunneling", J. Phys. C **21**, 6207 (1988).
- [15] D. Bohm, "Quantum Theory", Prentice-Hall New York (1952).
- [16] E. P. Wigner, "Lower limit for the energy derivate of scattering Phase Shift", Phys. Rev. **98**, 145-147 (1955).
- [17] S. Collins, D. Lowe, J. R. Barker, "The quantum mechanical tunneling problem-revisited", J. Phys. C **20**, 6213-6232 (1987).
- [18] H. Winful, "Nature of 'Superluminal' barrier tunneling", Phys. Rev. Lett. **90**, 0239011-0239014 (2003).
- [19] H. Winful, " Group delay, stored energy, and the tunneling of evanescent electromagnetic waves", Phys. Rev. E **68**, 016615 (2003).
- [20] C. R. Leavens, G. C. Aers, "Dwell time e phase times for transmission and reflection", Phys. Rev. B **39**, 1202-1206 (1989).
- [21] H. Winful, "Delay time and Hartman effect in quantum tunneling", Phys. Rev. Lett. **91**, 2604011-2604014 (2003).
- [22] G. Garcia-Calderon, A. Rubio, "Properties of the dwell time and the transmission and reflection times for resonant tunneling", Solid State Commun **71**, 237 (1989).
- [23] A. Ranfagni, D. Mugnai, P. Fabeni, G. Pazzi, "Delay-time measurements in narrowed wave-guides as a test of tunneling", Appl. Phys. Lett. **58**, 774 (1991).
- [24] D. Mugnai, A. Ranfagni, R. Ruggeri, A. Agresti, "Path-integral solution of the telegrapher equation - an application to the tunneling determination", Phys. Rev. Lett **68**, 259 (1992).
- [25] T. Martin, R. Landauer, "Time-delay of evanescent electromagnetic-waves and the analogy to particle tunneling", Phys. Rev. A **45**, 2611 (1992).
- [26] A. M. Steinberg, P. G. Kwiat, R. Y. Chiao, "Measurement of the single-photon tunneling time", Phys. Rev. Lett. **71**, 708 (1993).
- [27] Ch. Spielmann, R. Szipöcs, A. Stingl, F. Krausz, "Tunneling of optical pulses through photonic band gaps", Phys. Rev. Lett. **73**, 2308 (1994).
- [28] J. L. Agudin, "Time delay of scattering processes", Phy. Rev. **171**, 1385 (1968).
- [29] Ph. Balcou, L. Dutriaux, "Dual optical tunneling times in frustrated total internal reflection", Phys. Rev. Lett. **78**, 851 (1997).

- [30] A. Enders, G. Nimtz, "Evanescent-mode propagation and quantum tunneling", *Phys. Rev. E* **48**, 632 (1993).
- [31] A. Enders, G. Nimtz, "Zero-time tunneling of evanescent mode packets", *J. Phys. I France* **3**, 1089 (1993).
- [32] M. Mojahedi, K. J. Malloy, G. V. Eleftheriades, J. Woodley, "Abnormal wave propagation in passive media", *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* **9**, 30 (2003).
- [33] , L. Poirier, "Long-range superluminal pulse propagation in a coaxial photonic crystal", *Appl. Phys. Lett.* **80**, 518 (2002).
- [34] J. J. Carey, J. Zawadzka, D. A. Jaroszynski, K. Wynne, "Noncausal time response in frustrated total internal reflection?", *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1431 (2000).
- [35] M. T. Reiten, D. Grischkowsky, R. A. Cheville, "Optical tunneling of single-cycle terahertz bandwidth pulses", *Phys. Rev. E* **64**, 036604 (2001).
- [36] S. Yang, J. H. Page, Z. Liu, M. L. Cowan, C. T. Chan, P. Sheng, "Ultrasound tunneling through 3D phononic crystals", *Phys. Rev. Lett.* **88**, 104301 (2002).
- [37] W. M. Robertson, J. Ash, J. M. McGaugh, "Breaking the sound barrier: tunneling of acoustic waves through the forbidden transmission region of a one-dimensional acoustic band gap array", *Am. J. Phys.* **70**, 689 (2002).
- [38] A. E. Bernardini, "Principle of stationary phase for propagating wave packets in the unidimensional scattering problem", *Eur. Phys. J. C* **56**, 545-556 (2008).
- [39] A. E. Bernardini, "The exact correspondence between phase times and dwell times in a symmetrical quantum tunneling", *Eur. Phys. J. C* **53**, 673-678 (2008).
- [40] H. Winful, "The meaning of group delay in barrier tunneling: a re-examination of superluminal group velocities", *New J. Phys.* **08**, 101-117 (2006).
- [41] H. Winful, "Energy storage in superluminal barrier tunneling: origin of the Hartman effect", *Opt. Express* **10**, 1491 (2002).
- [42] A. E. Bernardini, S. De Leo, P. P. Rotelli, "Above barrier potential diffusion", *Mod. Phys. Lett. A* **19**, 2717-2725 (2004).
- [43] S. De Leo, P. P. Rotelli, "Above barrier Dirac multiple scattering and resonances", *Eur. Phys. J. C* **46** 551-558 (2006).
- [44] S. De Leo, P. P. Rotelli, "Tunneling through two barriers", *Physics Letters A* **342**, 294-298 (2005).

- [45] S. De Leo, P. P. Rotelli, "Localized beams and dielectric barriers", *J. Opt. A* **10**, 115001 (2008).
- [46] D. S. Jones, "Fourier Transforms and the Method of Stationary Phase", *J. Inst. Maths. Applics.* **2**, 197-222 (1966).
- [47] E. Pollak, W. H. Miller, "New Physical Interpretation for Time in Scattering Theory ", *Phys. Rev. L.* **53**, 115-118 (1984).
- [48] J. P. Falck, E. H. Hauge, "Larmor clock reexamined", *Phys. Rev. B* **38**, 3287 (1988).
- [49] W. Jaworski, D. M. Wardlaw, "Time-delay in tunneling - transmission and reflection time delays", *Phys. Rev. A* **37**, 2843 (1988).
- [50] E. H. Hauge, J. A. Stovneng, "Tunneling times: a critical review", *Rev. of Mod. Phys.* **61**, 917-936 (1989).
- [51] V. M. Aquino, V. C. Aguilera-Navarro, M. Goto, H. Iwamoto, "Tunneling Time Through a Rectangular Barrier", *Phys. Rev. A* **58**, 4359-4366 (1998).
- [52] P. Krekora, Q. Su, R. Grobe, "Effects of relativity on the time-resolved tunneling of electron wave packets, *Phys. Rev. A* **64**, 022105 (2001).
- [53] V. S. Olkhovsky, E. Recami, G. Salesi, " Superluminal tunneling through two successive barriers", *Europhys. Lett.* **57**, 879 (2002).
- [54] M. Büttiker, S. Wasburn, "Ado about nothing much?", *Nature* **422**, 271-272 (2003).
- [55] H. Winful, "Mechanism for 'superluminal' tunneling", *Nature* **424**, 638-639 (2003).
- [56] N. Yamada, "Unified derivation of tunneling times from decoherence functional", *Phys. Rev. Lett.* **93**, 1704011-1704014 (2004).
- [57] P. C. W. Davies, "Quantum tunneling time", *Am. J. Phys.* **73**, 23-27 (2004).
- [58] Z. S. Wang, L. C. Kwek, C. H. Lai, C. H. Oh, "Quantum tunneling time", *Phys. Rev. A* **69**, 0521081-0521085 (2004).
- [59] H. Winful, "Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: A proposed resolution of an old paradox", *Phys. Reports* **436**, 1-30 (2006).